وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الموصل

فيزياء الحالة الصلبة

تأليف

الدكتور صبحي سعيد الراوي
الدكتور شاكر جابر شاكر
الدكتور يوسف مولود حسن

متاح للتحميل ضمن مجموعة كبيرة من المطبوعات من صفحة
مكتبتي الخاصة
على موقع ارشيف الانترنت
الرابط
https://archive.org/details/@hassan_ibrahem

فيزياء الحالة الصلبة

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الموصل



تأليف

الدكتور صبحي سعيد الراوي
مدرس

الدكتور شاكر جابر شاكر
مدرس

الدكتور يوسف مولود حسن
مدرس

بسم الله الرحمن الرحيم

المقدمه

يمثل هذا الكتاب محاولة لسد النقص الحاد الموجود حالياً في المكتبة العربية في موضوع حديث ومتقدم يحظى اليوم بأهتمام واسع ومتزايد لما يحمله هذا العلم طموحات مستقبلية لها من القيمة العلمية والعملية القدر الكبير.

لقد وضع هذا الكتاب ليغطي مفردات فيزياء الحالة الصلبة لطلبة الفيزياء في كليات التربية والعلوم وقد راعينا فيه ان يكون شاملاً سهل الاسلوب واضح المعاني ليتسنى فهمة والاستفاده منه .

ان هذا الكتاب يحتوي على اثنى عشر فصلاً . قام المؤلفون بتوزيع الفصول على النحو الاتي : تولى الدكتور (يوسف مولود حسن) بتأليف الفصول الاربعة الاولى التي تتضمن مواضيع التركيب البلوري والاواصر البلورية والحيود وحركية الشبيكة والخواص الحرارية للعوازل في حين تولى الدكتور (شاكر جابر شاكر) تأليف ما يتعلق بالالكترونات الحرة في المعادن ونظرية الحزم في المواد الصلبة والخواص المغناطيسية للمواد والتوصيلية المفرطة . وتولي الدكتور (صبحي سعيد الراوي) تأليف المواضيع التي تتضمن اشباه الموصلات والعوازل والخواص البصرية للمواد الصلبة والعيوب البلورية .

والمؤلفون اذ يضعون جهدهم المتواضع بين ايدي الاساتذه الافاضل والطلبة الاعزاء لايدعون الكمال له لان الكمال لله وحده لذا فأنهم ينتظرون من المتخصصين والقراء الكرام برحابة صدر النقد البناء والافكار الجديدة لاخذها بالاعتبار في الطبعات المقبلة للكتاب .

ولايسعنا في هذه المقدمة الموجزة لكتابنا هذا إلا ان نقدم جزيل شكرنا الى جامعة الموصل لما اولته من اهمية كبيرة لتعريب الدراسة ودعمها المتواصل لتأليف هذا الكتاب كما نقدم شكرنا للمقيم العلمي الدكتور (وكاع فرمان الجبوري) الاستاذ المساعد في كلية الهندسة على ملاحظاته القيمة واقتراحاته السديدة . كما نوجه شكرنا الى السيد (عبد الوهاب محمود الكحلة) المدرس في كلية التربية على جهوده في تصحيح الهفوات اللغوية .

ومن اللة التوفيق

المؤلفون

محتويات الكتاب

الفصل الثاني

الاواصر البلورية

الفصل الثالث

الحيود في البلورات

الفصل الرابع

حركية الشبيكة والخواص الحرارية للعوازل

الفصل الخامس

الالكترونات الحرة في المعادن

الفصل السادس

نظرية الحزم في المواد الصلبة

الفصل السابع

اشباه الموصلات

الفصل العاشر

الخواص البصرية للمواد الصلبة

الفصل الحادي عشر

العيوب البلورية

الفصل الثاني عشر
الموصّلية المفرطة

الفصل الأول

التركيب البلوري

1 - 1 المقدمة :-

ليس كل شيء يظهر كمادة صلبة امام العين يدرس في كتب فيزياء الحالة الصلبة ان علم الفيزياء الحالة الصلبة الحديث يهتم بدراسة صنف خاص من المواد الصلبة وهو المواد الصلبة البلورية (Crystalline Solid) . وان الجزء الاكبر من هذا الكتاب سيتناول دراسة الصلب البلوري . كما في هذا الفصل سنناقش بعض التعاريف الاساسية المتعلقة بالمواد البلورية ولاصطلاحات المستعملة في علم البلورات (Crystallography). ومع ان الزجاج والخشب والورق هي من المواد الصلبة ولكن مناقشتها خارج نطاق هذا الكتاب وذلك لان المواضيع المتعلقة بهذا النوع من المواد الصلبة معقد جدا .

2 - 1 تصنيف المواد الصلبة

يمكن تصنيف المواد الصلبة بصورة عامة الى الاصناف التالية :

1- تصنف البلورات بالنسبة للشبيكة البلورية الى :

a- البلورات ذات الشبيكة البرافيزية (Bravais lattice)
b- البلورات ذات الشبيكة غير البرافيزية (Non Bravais lattice)

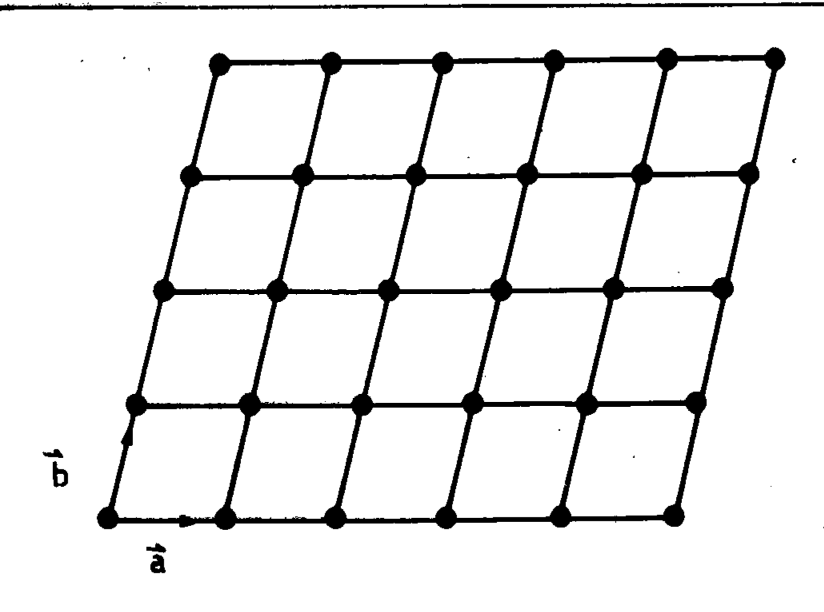
2- تصنف المواد الصلبة بالنسبة لتوصيلها الكهربائي الى :
a- المعادن (Metals)
b- اشباه الموصلات (Scmiconductors)
c- العوازل (Insulators)

3- تصنف المواد الصلبة بالنسبة الى خواصها المغناطيسية الى :
a- المواد الدايامغناطيسية (Diamagnetic materials)
b- المواد البارا المغناطيسية (Paramagnetic materials)
c- المواد الفيرومغناطيسية (Ferromagnetic materials)

4- تصنف المواد الصلبة بالنسبة لطاقة الربط بين ذراتها اوجزيئاتها الى :
a- البلورات الايونية (Ionic crystals)
b- البلورات التساهمية (Covalent crystals)
c- البلورات الجزيئية (Molecular crystals)
d- البلورات المعدنية (Metalic crystals)

3 - 1 الحالة البلورية

يقال عن الجسم الصلب بانه بلوري(crystal)اذا كانت الذرات مرتبة بشكل هندسي بحيث تكون مواقعها دورية في هذا الشكل . وتسمى هذه الدورية في الغالب بترتيب طويل المدى (Longe-range order). وعندما يكون هذا الترتيب في ثلاثة ابعاد فيعني ذلك اننا نتكلم عن البلورة وتكون ذات عنصر منتظم ومحدد بصورة جيدة والشكل 1.1 يوضح هذا الترتيب في بعدين .



الشكل(1 - 1) ترتيب نقاط الشبيكة في بعدين

ان المسافة بين اقرب ذرتين في اتجاه محور x هي a وباتجاه محور y هي b وليس بالضرورة ان تكون هذان المحوران متعامدين مع البعض . وتحتفظ البلورة التامة (crystal perfect) بهذه الدورية وفي ابعادها الثلاثة والى ما لانهاية لكل من المحاور . ويترتب على العملية الدورية ان تكون مواقع الذرات في البلورة متكافئة اوبعبارة اخرى . تبدو البلورة التامة للناظر المستقر في اي من هذه المواقع الذرية هي نفسها .

كثيرا ما يعبر عن فكرة الدورية في البلورات بالقول ان البلورة تمتلك تناظراً انتقاليا (translation symmetry) . يعني انه اذا تحركت نقطة ما وبواسطة اي متجه يربط بين نقطتين تبدو النقطة وكأنها لم تتحرك اي ان ما يجاورها لم يتغير .

من الناحية العملية لا يمكن تحضير بلورة تامة لاسباب عديدة ومنها :

1 - ان سطح البلورة يشكل عيبا من عيوب البلورة وذلك لان الدورية التي تمتلكها سوف تضطرب على السطح . فالذرات القريبة من السطح تكون في محيط يختلف عن محيط الذرات الواقعة في عمق البلورة ونتيجة لذلك تسلك سلوكاً مختلفا عن جسم البلورة .

2- الاهتزازات الحركية للذرات الحركية حول مواقع استقرارها قد تؤثر على التنظيم الدوري للبلورة بدرجة كبيرة او صغيرة اعتمادا على درجة الحرارة .

3- بالرغم من التقنيات المتقدمة لانماء البلورات لا تزال هناك بعض الشوائب والتشوه في البلورات التامة والتي لا يمكن التخلص منها حتى في احسن عمليات الانماء البلوري والتي تؤثر ايضا على دورية البلورة .

ان العيوب في البلورات كثيرا ما تكون موضع الدراسة للمهتمين بفيزياء الحالة الصلبة . فمثلا ان الاهتزازات الحركية للذرات هي المصدر الرئيسي للمقاومة الكهربائية في المعادن والتوصيلية في العوازل . وهكذا فانه لا يمكن فهم هذه الخواص بدون دراسة البلورات وتركيبها ، ويمكن اعتبار العيوب المهمة اضطرابا في التركيب البلوري ان معظم الظواهر المهمة في المواد الصلبة ترافق العيوب البلورية ولذلك نرى ان هذا الموضوع من اهم المواضيع في فيزيا اشباه الموصلات والتي ستناقش في الفصل السابع

1 - 4 اتعاريف اساسية

لكي نفهم التركيب البلوري بدقة ، من الضروري شرح بعض التعاريف الاساسية والتي تقوم مقام اللغة في علم البلورات (crystallography) . وهذه التعاريف يمكن تطبيقها على البلورات ذات بعد واحد اوبعدين او ثلاثة ابعاد منها :

1 - 4 - 1 الشبيكة البلورية

في علم البلورات تكون الخواص الهندسية هي موضع الاهتمام وليس تركيب المادة التي تنشأ من الذرات المكونة للبلورة . وعليه يستبدل المرء كل ذرة بنقطة هندسية تقع في موضع استقرار تلك الذرة وبذلك تكون النتيجة هي هيكل(pattern)هندسي من النقاط يمتلك الخواص الهندسية للبلورة نفسها ، ولكن يخلو من اي مكونات مادية وهذا الهيكل الهندسي في الفراغ يسمى الشبيكة البلورية (Crystal latice)وتكون على نوعين

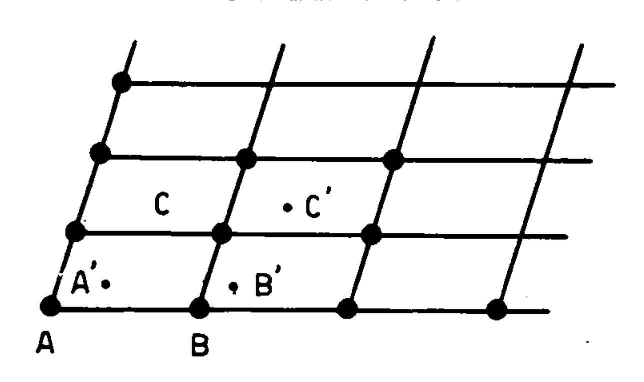
(a) الشبيكة البرافيزية

في هذه النوع من الشبيكة تكون جميع نقاط الشبيكة متكافئة ، أي أن جميع الذرات في البلورة تكون من نفس النوع .

(b) الشبيكة غير البرافيزية

في هذا النوع من الشبيكة تكون نقاط الشبيكة غير متكافئة كما في الشكل (1 - 2) ، حيث تكون مواقع A, B, C متكافئة مع بعضها ايضاً . لكن المواقع A,A′ غير متكافئة مع بعضها .

يمكن اعتبار الشبيكة غير البرافيزية كمزيج من شبيكتين أو أكثر من الشبيكات البرافيزية متداخلة مع بعضها بوضع ثابت بالنسبة لبعضها الآخر . أي أن النقاط A, B, A تكون شبيكة برافيزية واحدة و A′, B′, C′ تكون شبيكة برافيزية أخرى وهكذا .



الشكل 2 - 1 الشبيكة غير البرافيزية

2 - 4 - 1 الاساس

هو عبارة عن ذرة أو مجموعة من الذرات تتواجد في كل موقع نقطي من نقاط الشبيكة ويتراوح عدد الذرات في الأساس (Base) من ذرة الى 10^5 ذرة .

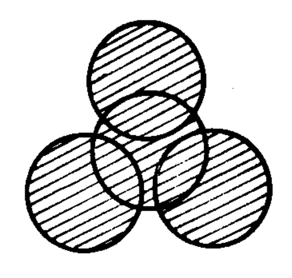
3 - 4 - 1 متجهات الانتقال الاساسية

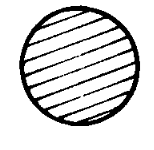
تتكون البلورات التامة من ذرات مرتبة على هيئة الشبيكة البلورية ويمكن تعريفها بواسطة ثلاث متجهات إنتقالية أساسية $\vec{c}, \vec{b}, \vec{a}$ بحيث أن الترتيب يبقى نفسه بالنسبة الى النقطة المعبرة عنها بالمتجه $\vec{r}$ عند مشاهدتها من نقطة أخرى

$\vec{r}'$ كما في الشكل (4 - 1) . ويمكن التعبير عن ذلك رياضياً بالمعادلةالتالية :

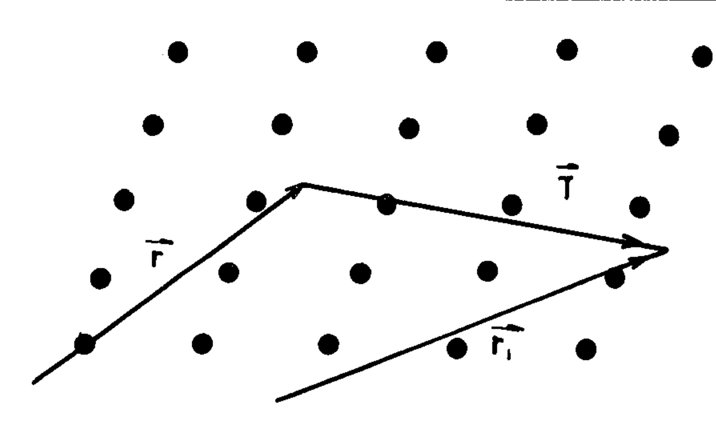
$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \qquad \dots (1-1)$$

حيث n_3 , n_2 , n_1 اعداد صحيحة .



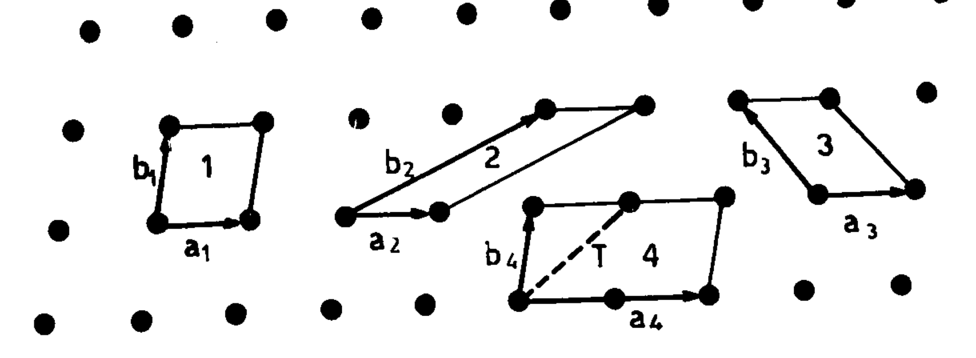


الشكل 3 - 1 : يوضح نوعين مختلفين من الاساس



الشكل(4 - 1)التناظر الانتقالي في الشبيكة ذات البعدين

تكـون الشبيكة والمتجهات والأنتقالية $\vec{c} , \vec{b} , \vec{a}$ بدائية (primitive) اذا حققــت النقطتـان $\vec{r}' , \vec{r}$ اللتـان يبدو الترتيـب الذري حولهمـا واحـداً المعادلة (1 - 1) وذلك بأختيار مناسب لكل من n_3 , n_2 , n_1 . وتستخدم عادة المتجهات الأنتقالية البدائية $(\vec{a} , \vec{b} , \vec{c})$ لمحاور للبلورة وقد تستخدم محاور غير بدائية عندما يتطلب ذلك وكما هوموضح في الشكل (5 - 1) .



الشكل (5 - 1) محاور بدائية وغير بدائية للشبيكة البلورية

في هذا الشكل من الممكن اختيار كل من المتجهين $\vec{a}_1 \vec{b}_1$ و $\vec{a}_2 \vec{b}_2$ وكذلك $\vec{b}_3 \vec{a}_3$ حيث يمكن اعتبارها كمتجهات بدائية . ولكن اختيارها $\vec{b}_4 , \vec{a}_4$ تمثل متجهات انتقالية غيربدائية ، وعلى اية حال فان المساحة المحصورة بين المتجهات البدائية تبقى ثابتة .

4 - 4 - 1 التركيب البلوري

يتكون التركيب البلوري عندما نربط الأساس (ذرة أو مجموعة من الذرات) بكل نقطة من نقاط الشبيكة كما من في الشكل (6 - 1) حيث كل أساس يجب أن يكون متماثلاً في التركيب والترتيب والأتجاه واءن العلاقة المنطقية التي توضح ذلك هـــي :

تركيب البلوري = الأساس + الشبيكة

الشبيكة + الأساس = البلورة

الشكل (6 - 1) التركيب البلوري

5 - 4 - 1 عملية انتقال الشبيكة

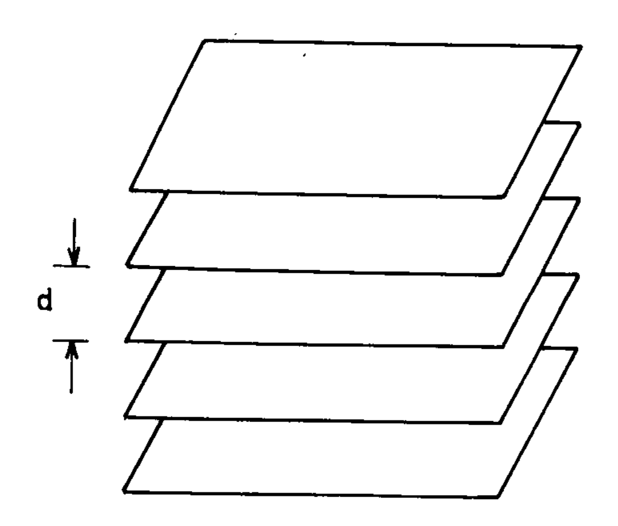
تعَّرف عملية انتقال الشبيكة بأنها عملية انتقال البلورة بصورة موازية تحت تأثير المؤثر $\vec{T}$ (Operator) بحيث

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n\vec{b} + n_3 \vec{c}$$

و n_3, n_2, n_1 اعداد صحيحة وهذا موضح في الشكل (4 - 1) .

6 - 4 - 1 ثابت الشبيكة

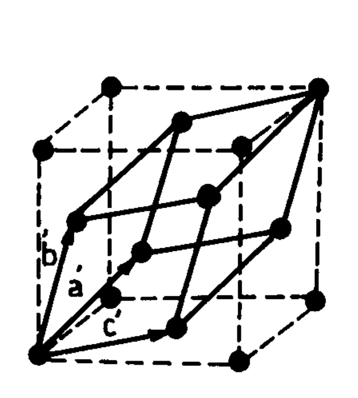
هو أقصر مسافة عمودية بين مستويات الشبيكة كما هو موضح في الشكل (7 - 1) حيث يمثل d ثابت الشبيكة (lattice constant)

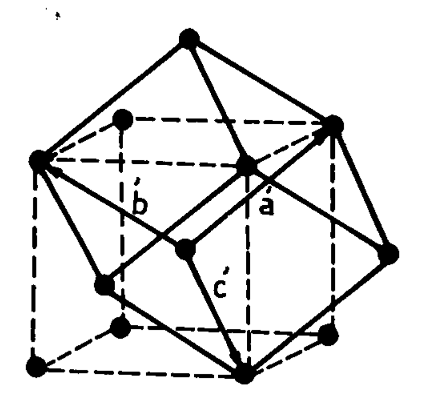


الشكل (7 - 1) مجموعة من المستويات الشبيكة

7 - 4 - 1 وحدة الخلية

هي أصغر وحدة في الشبيكة تملأ الفضاء بتأثر المؤثر $\vec{T}$ ويكوّن شبيكة كاملة . ان الشكل (5 - 1) يوضح نماذج من وحدة الخلايا (unit cells) في بعدين والشكل (8 - 1) يوضح نماذج من وحدة الخلايا في ثلاثة ابعاد .





الشكل (8 - 1) وحدة الخلايا التقليدية (المنقطة) والبدائية (المخططة) في ثلاثة أبعاد

ان حجم وحدة الخلية (V_p) بدلالة المتجهات الأساسية يعطى بالعلاقة التاليـــة :

$$V_p = |\vec{a} \times \vec{b} . \vec{c}|$$

وتنقسم وحدة الخلية الى نوعين

(a) الخلية البدائية (primitive cell)

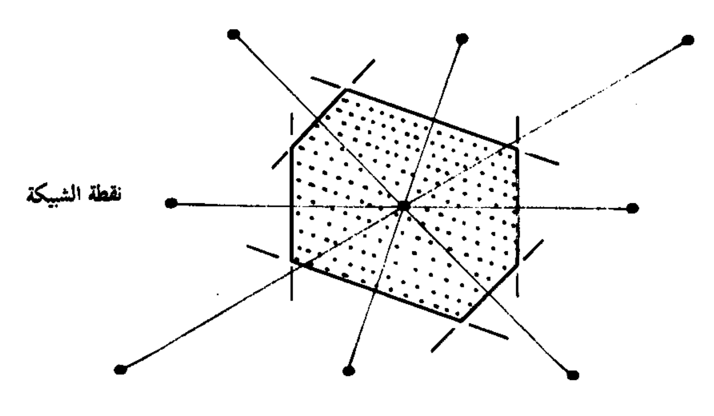
(b) الخلية غير البدائية (non primitive cell)

ان الخلية البدائية هي الخلية التي تحتوي على ثماني ذرات في أركانها (لاحظ الشكل (8 - 1) . وبما ان في الخلية البدائية كل ذرة مشتركة بين ثماني خلايا (في ثلاثة ابعاد) فانها سوف تعطي حصتها والتي تساوي $\frac{1}{8}$ لكل خلية وبالتالي فان حصة وحدة الخلية البدائية ستكون نقطة شبيكة واحدة .

اما الخلية غير البدائية (non- primitiue) فانها تحتوي ذرة في مركز الخلية او متوسط سطوحها اضافة الى ذرات اركانها كما في الشكل (8 - 1) وهكذا نجد انه في الخلية غير البدائية هناك اكثر من نقطة شبيكة في الخلية الواحدة .

هناك طريقة اخرى لاختيار الخلية البدائية وتعرف باسم مكتشف هذه الطريقة وهي خلية ويكنر – سيتز (Wegner-Seitz cell) وتلخص هذه الطريقة بما يلي :

نمد خطوطا مستقيمة من نقطة شبيكة ما الى جميع نقاط الشبيكة القريبة منها ، ثم ننصف هذه الخطوط بمستويات متعامدة وسيكون الحجم المحصور بين المستويات المتعامدة هو خلية بدائية وتحتوي على نقطة شبيكة واحدة .



الشكل (9 - 1) خلية ويكينر – سيتز البدائية

1 - 5 عمليات التناظر

ان من اهم المميزات التي يتصف لها البناء البلوري هي عمليات التناظر (symmetry operation) والتي باجراءها يعود البناء البلوري الى وضعه الاصلي .

وعملية الأنتقال تحت تأثير المؤثر $\vec{T}$ هي ليست العملية الوحيدة التي تتميز بها البلورة بل هناك عمليات اخرى ومنها عملية الدوران (rotation operation)

وعملية الأنعكاس (reflection operation) وكذلك عملية الأنقلاب (Inversion operation)

ويمكن تطبيق العمليات الثلاثة الأخيرة في وقت واحد عند نقطة معينة لوحدة البلورة وبذلك تعود البلورة الى وضعها الأصلي وتسمى هذه العملية بالعملية النقطية (point operation)

أدناه شرح مفصل لكل من هذه العمليات الثلاثة :

1 - 5 - 1 عملية الدوران

يتطلب هذا النوع من العملية معرفة عدد المرات التي تعيد فيها الشبيكة البلورية شكلها أثناء دوراتها دورة كاملة ($2\pi = 360^\circ$) . ويسمى عدد المرات التي تعيد فيها الشبيكة البلورية نفسها بعدد الطيات (number of folds) ويرمز لها بالحرف n .

ان الشبيكات البلورية المختلفة تحتوي على محاور دورانية احادية وثنائية وثلاثية ورباعية وسداسية كما هو موضح ادناه

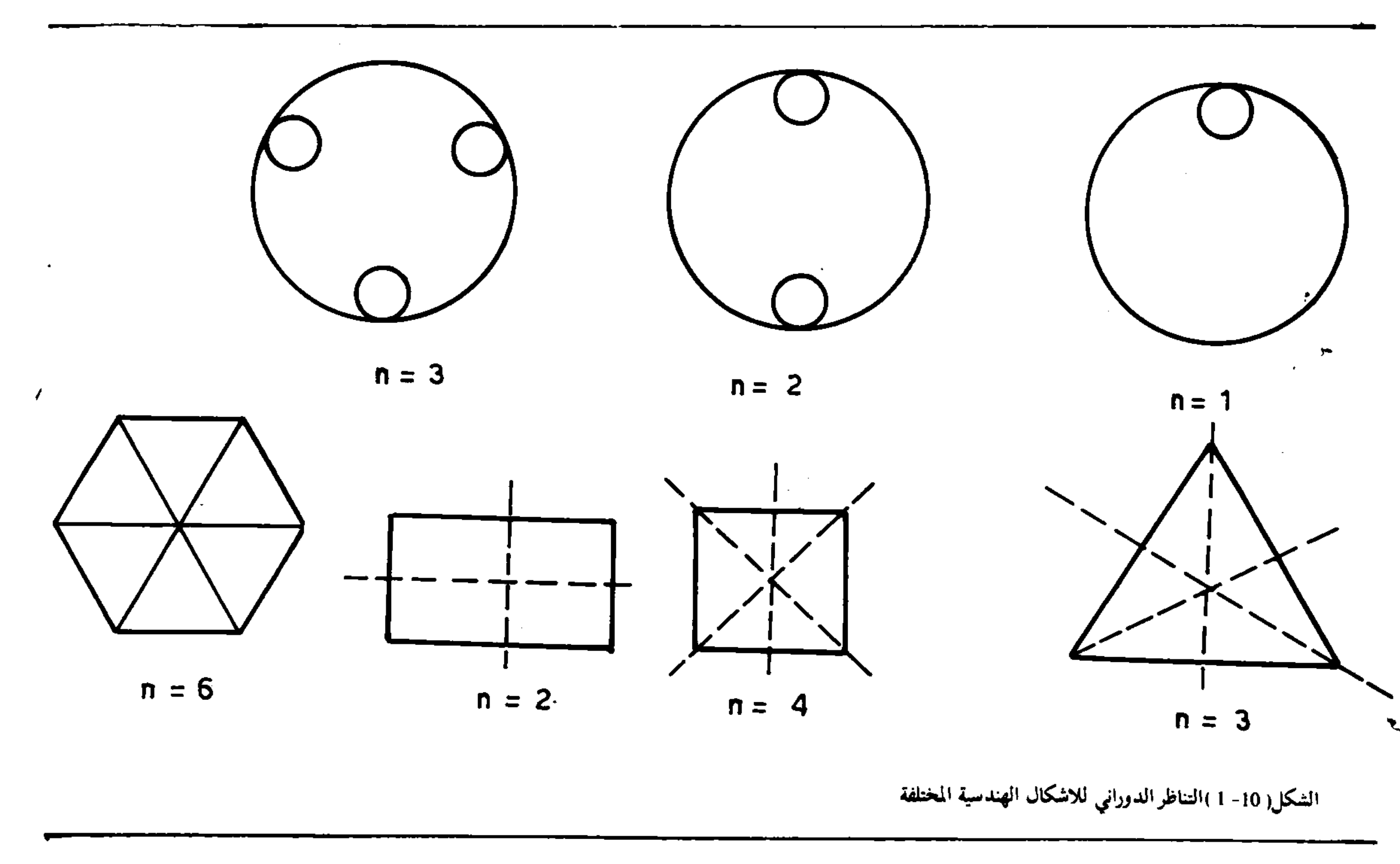
عدد الطيات — n :	1	2	3	4	6
الزوايا المناظرة لها :	2π	$\frac{2\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{4}$	$\frac{2\pi}{6}$

ولفهم هذا لاحظ التناظر الدوراني في الأشكال الهندسية الموضحة في الشكل (10 - 1)

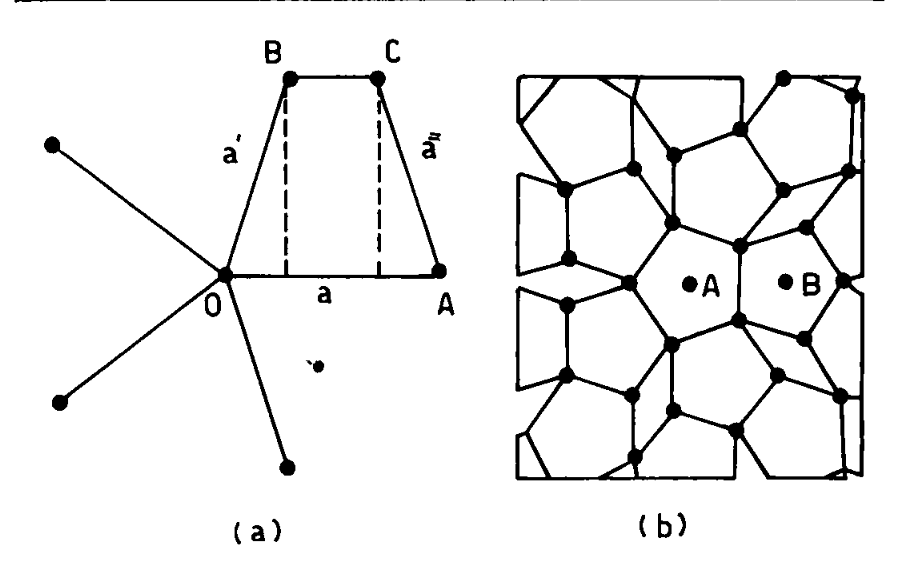
ان البلورة التي لها ثلاث طيات مثلاً (n = 3) يمكن أن تعيد نفسها بعد الدوران بزاوية $\frac{2\pi}{3}$ كما في مثلث متساوي الأضلاع .

ان البلورة الحقيقية تفتقر الى التناظر الخماسي والسباعي حيث لا يمكن أن تعود البلورة الى وضعها الأصلي عند الزاويتين $\frac{2\pi}{5}$ و $\frac{2\pi}{7}$ ويمكن برهان ذلك رياضياً حيث أن التناظر الخماسي (n = 5) يناقض التناظر الأنتقالي والذي هو من المميزات الأساسية لأي عملية انتقال في البلورة التامة .

لنفرض أن شبيكة خيالية لها تناظر ذو خمس طيات كما مبين في الشكل (1 - 11 a) ان كل نقطة شبيكة تمثل محوراً لخمس طيات : والآن لنأخذ النقطتين A,O حيث



الشكل (10 - 1) التناظر الدوراني للاشكال الهندسية المختلفة



الشكل(11 - 1) (a) – التناظر الخماسي يناقض التناظر الانتقالي
(b) – التناظر الخماسي يترك الفجوات في الشبيكة

المسافة بينهما هي المتجهه الأساسي (Fundamental Vector) للشبيكة $\vec{a}$ ($\vec{a}$ = OA). اذا دارت المتجهة $\vec{a}$ حول نقطة 0 بزاوية $\frac{2\pi}{5}$ سنحصل على المتجهه $\vec{a}'$ ($\vec{a}'$ = OB) حيث $\vec{a}$ هي أيضا متجهة الشبيكة و B نقطة الشبيكة لأنها وجدت بدوران متجهه $\vec{a}$ والأن لوأخذنا (A) كمحور للدوران فمن الممكن استنباط متجهه الشبيكة $\vec{a}''$ ($\vec{a}''$ = AC) وذلك بدوران المتجهه ($-\vec{a}$) بزاوية $\frac{2\pi}{5}$ حول نقطة A بهذا تكوّن نقطة الشبيكة C ولذا يجب أن يكون BC متجهه الشبيكة لأنّ نقاط الشبيكة عادة توصل بواسطة متجهات الشبيكة الأساسية ولكن كما هومبين في الشكل فأن طول BC اقل من a حيث أن

$$BC = a - 2x$$

$$\cos \frac{2\pi}{5} = \frac{x}{a}$$

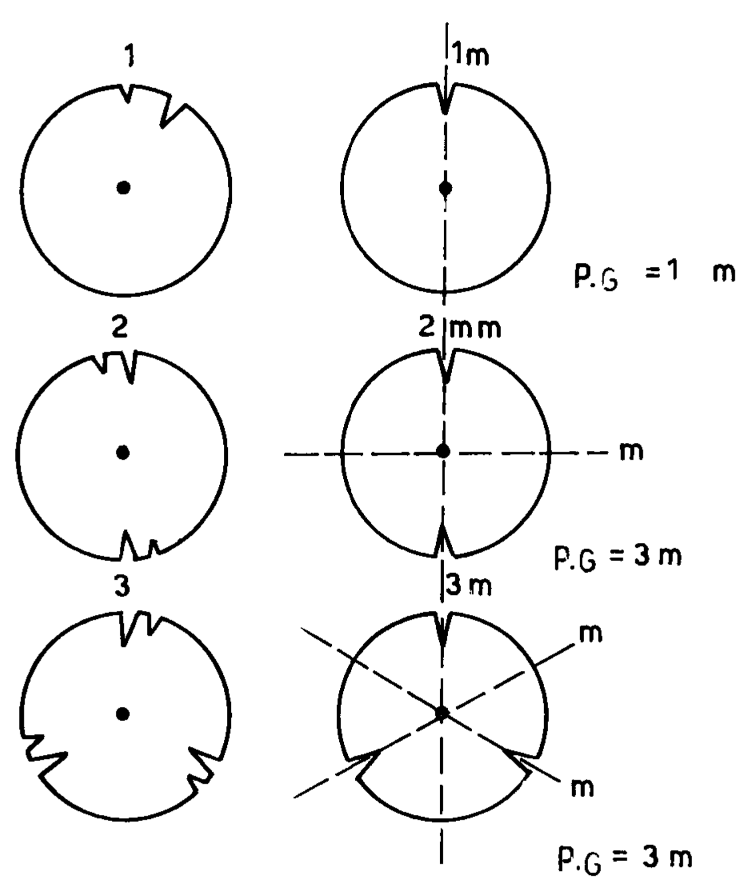
$$x = a \cos \frac{2\pi}{5}$$

$$BC = \left| a - 2a \cos \frac{2\pi}{5} \right| = 0.382a$$

وبما أن $BC < |a|$ فأن هذا لا يتفق مع عملية التناظر الأنتقالي لأن الأنتقال المسموح في هذه العملية يجب أن يكون مساويا أواكبر من المتجهات الأنتقالية الأساسية ($\vec{a}$)كما هو موضح في الشكل (1 - 11a) .

التناظر الانعكاسي

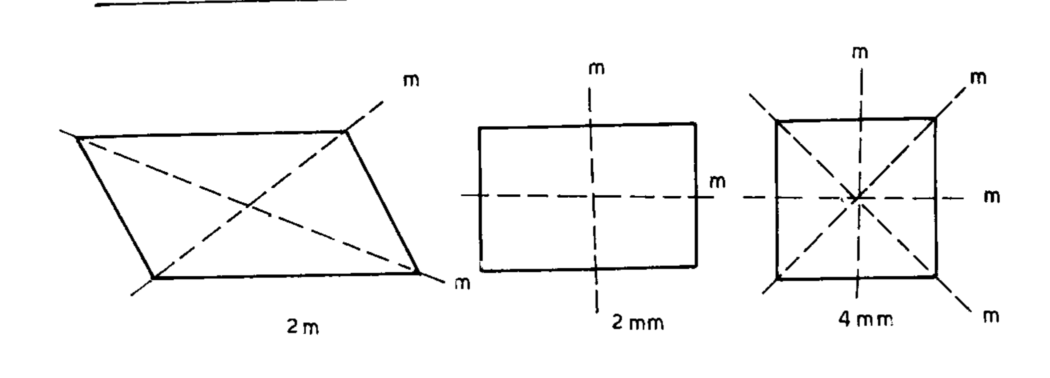
ان الجسم يمتلك التناظر الأنعكاسي حول اي مستوى اذا لم تتغير مواصفاته بعد الأنعكاس من هذا المستوى . لاحظ العمود الأيمن من الشكل (12 - 1) حيث يوضح التناظر الأنعكاسي ومستويات الأنعكاس في حلقات مسننة في بعدين . هذه الحلقات



الشكل(12 - 1) ست أشكال في بعدين توضح التناظر الانعكاسي ومجموع النقطي للاشكال الهندسية

لها طية واحدة ($n = 1$) واءثنين ($n = 2$) وثلاث طيات ($n = 3$) وكذلك فأن هذه الحلقات تملك التناظر الأنعكاسي حول المستويات المؤشرة والمارة في مراكز الحلقات بينما الحلقات المرسومة في العمود الأيسر لها طية واحدة ($n = 1$) ولكن لا تمتلك التناظر الأنعكاسي .

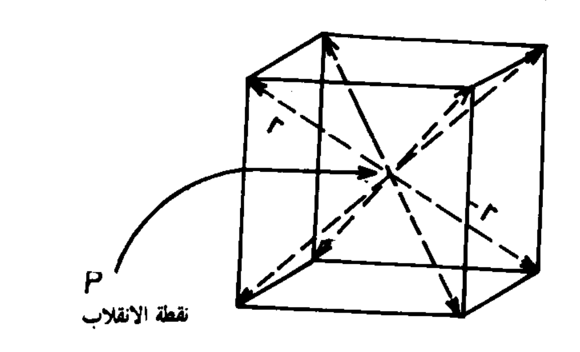
من الممكن ملاحظة أنه كلما كان n عددا فردياً ($n = 1,3,...$) فأن الشكل الهندسي لا يمتلك التناظر الانعكاسي أوله مجموعة واحدة من التناظر الانعكاسي (m) اما اءذا كانت n عدداً زوجياً فهناك دوما للشكل الهندسي مجموعتان من المستويات الأنعكاسية (mm) . ويسمى مجموع التناظر الدوراني والتناظر الأنعكاسي بالمجموع النقطي (Point gronp) . ان مجموع النقطي لكل من الشبيكة المائلة والمستطيلة والمربعة موضح في الشكل (13 - 1) .



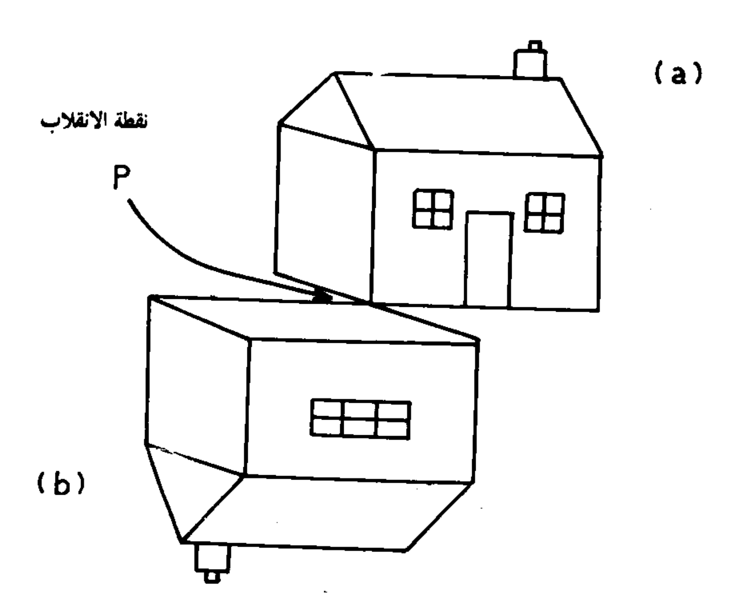
شكل 13 1 المجموع النقطي للشبيكة المربعة والمستطيلة والمائلة

التناظر الانقلابي

يمكن تعريف هذا النوع من التناظر في ثلاثة ابعاد في الشكل 1-14 فلواخذنا نقطة (p) في مركز المكعب . واوصلنا المتجهه من هذه النقطة الى نقطة أخرى داخل المكعب فأاذا لم يتغير الشكل بأجراء عملية تحويل $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ فيمكن القول بأن نقطة P هي نقطة الأنقلاب والجسم له تناظر انقلابي .



(a)



الشكل(14- 1) (a) عند اجراء عملية تحويل $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ لكل $\vec{r}$ فأن الجسم يحافظ على شكلة (b) شكل بسيط لتوضيح التناظر الانقلابي

6 - 1 أشكال الشبيكة ذات البعدين

من الممكن تصنيف الشبكات البلورية ذات البعدين على اساس التناظرالدوراني الى ثلاثة اشكال مختلفة وكما يلي :

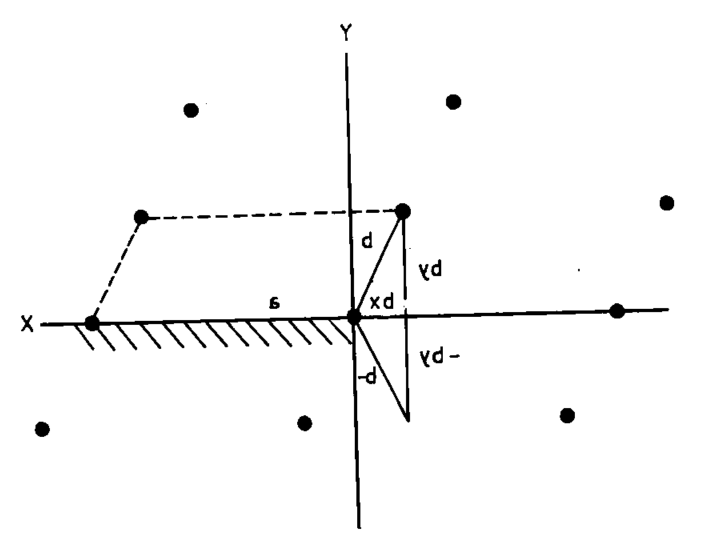
نوع الشبيكة	التناظر الدوراني	العلاقة بين محاور البلورة
المائلــة (Oblique)	2 – طية (2 – folds)	ϕ عشوائي $a \neq b$
المربعة (square)	4 - طية (4 – folds)	$a = b \quad \phi = 90^\circ$
السداسية (Hexagonal)	6- طية (6 – folds)	$a = b \quad \phi = 120^\circ$

من الممكن ملاحظة ان الشبيكة المربعة والشبيكة السداسية تمتلكان مجموعتيــن (two sets) من التناظر الانعكاسي ولكن الشبيكة المائلة لاتملك التناظر الانعكاسي

نفترض ان الشبيكة المائلة لها المتجهات الاساسية $\vec{b}, \vec{a}$ كما موضحة في الشكل (1-15) عند تدوير المحورين y , x بحيث يقع المتجه a على الاحداثي السينــي x فسوف نرى كيف تكون العلاقة بين $\vec{b}, \vec{a}$ عند اشتراط عملية التناظر الانعكاســـي على شبيكة المائلة . من الشكل(1-15) لدينا

$$\vec{a} = a_x i \qquad \dots (1\text{–}2)$$

$$\vec{b} = b_x i + b_y j \qquad \dots (1\text{–}3)$$



الشكل(15 -1)كيفية الحصول على الشبيكة المستطيلة عند اشتراط عملية الانعكاس المرآتي على الشبيكة المائلة

نفترض ان الاحداث السيني x يعمل كمرآة فعند انعكاس الشبيكة على هذا الخط المرآتي يمكن الحصول على المتجهات a' و b' حيث ان

$$\vec{a}' = a_x i \qquad \dots (1\text{-}4)$$
$$\vec{b}' = b_x i + b_y i \qquad \dots (1\text{-}5)$$

بما ان $\vec{a}$ هي متجه انتقالي فان $\vec{a} = \vec{a}^1$ ولكن ليس من الضروري ان تكون b' متجهاً انتقاليا ايضا ، بل من الممكن ان تكون متجها انتقاليا فقط عندعا $\vec{b}' = n_1\vec{a} + n_2\vec{b}$ وهذا من متطلبات التناظر الانتقالي . اذا عمل الاحداث السيني عمل مرآة عاكسة فسوف نحصل على المتجهين b', a' وان $\bar{b}$ يجب ان تكون متجه انتقالي اساسي وبامكاننـــا كتابة المعادلة على الشكل التالي :

$$b' = n_1 a + n_2 b = n_1 a_x i + n_2 (b_x i + b_y j) \qquad \dots (1\text{-}6)$$

ومن المعادلتين $(1\text{-}5), (1\text{-}6)$ يمكن الحصول على

$$b_x = n_1 a_x + n_2 b_x$$
$$-b_y = n_2 b_y$$

او

$$n_2 = -1$$

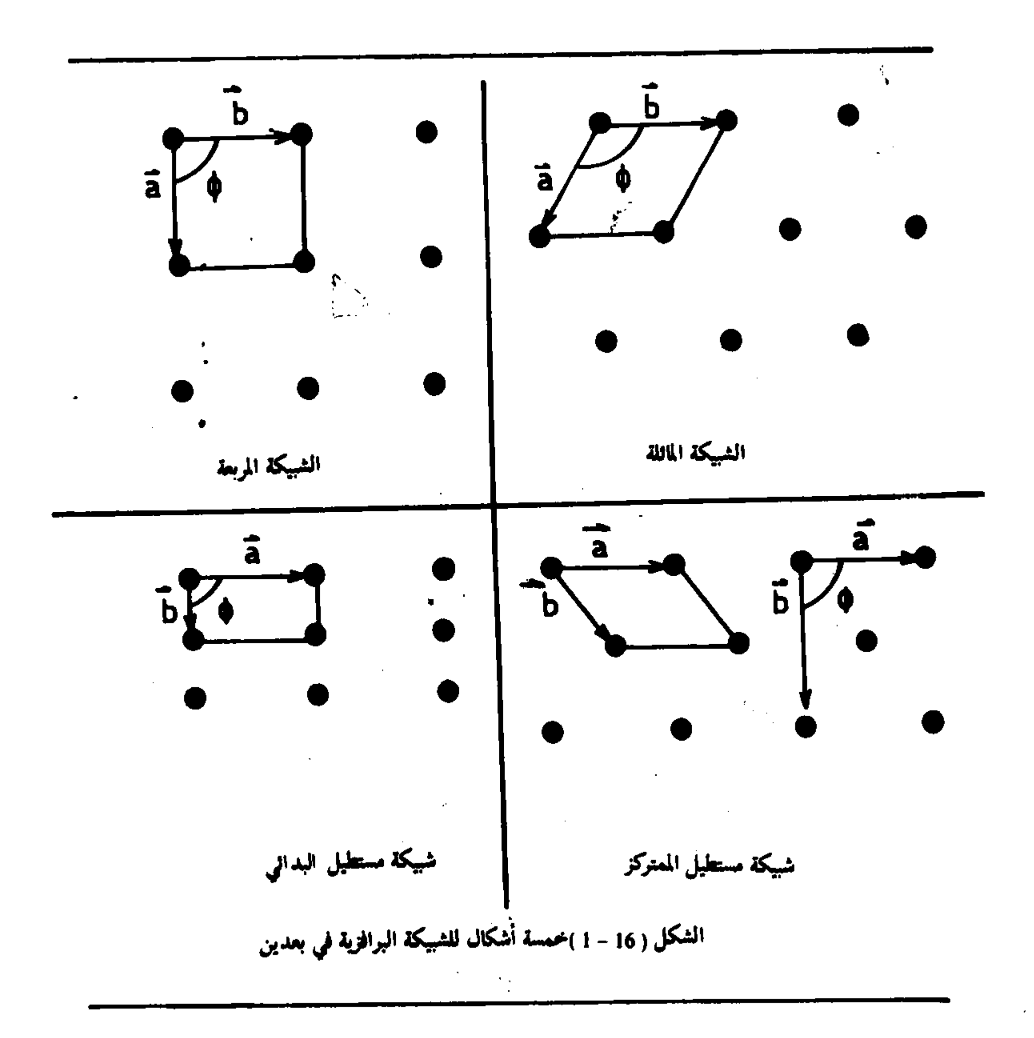
وعليه فان

$$b_x = \frac{n_1 a_x}{2} \qquad \dots (1\text{-}8)$$

اما b_y فانهاتأخذ قيما عشوائية . فعندما $n_1 = 0$ فان $b_x = 0$. عليه سوف نحصـــل على شبيكة مستطيلة بدائية وذلك لان $\vec{a} \times \vec{b} = 0$, $\phi = 90'$) حاول ان تثبت بان ذلك صحيح لجميع قيم الزوجية لـ n_1

عندما $n_1 = 1$ فان $b_x = \frac{a_x}{2}$ وعليه فسوف نحصل على مستطيل متمركـــز وهذا يكون صحيحا لجميع قيم n_1 الفردية . ويكون المتجه الانتقالي غير البدائي لهذه الشبيكة $\vec{a}$ و $(2\vec{b} - \vec{a})$ لان $[\vec{a}.(2\vec{b} - \vec{a}) = 0]$ عندما $b_x = \frac{a_x}{2}$.

والان اصبح من الواضح ان الشبيكةالبرافيزية في بعدين يمكن ان توجد في خمسة اشكال كما في الشكل(16-1) الجدول (1-1) يوضح مميزات وعناصر التناظر للاشكال المختلفة للشبيكة البرافيزية.



الشكل (16 - 1)خمسة أشكال للشبيكة البرافزية في بعدين

جدول (1-1)

الشبكة Lattice		محاور البلورة Crystal axis	المجموعة النقطية P. G
المربعة	Square	$a = b, \ \phi = 90°$	4mm
السداسية	Hexagonal	$a = b, \ \phi = 120°$	6mm
المستطيل البدائي	Primitive rectangular	$a \neq b \quad \phi = 90°$	2mm
المستطيل المتمركز	Centered rectangurar	$a \neq b \quad \phi = 90°$	2mm
المائلة		$a \neq b \quad \phi \neq 90°$	2

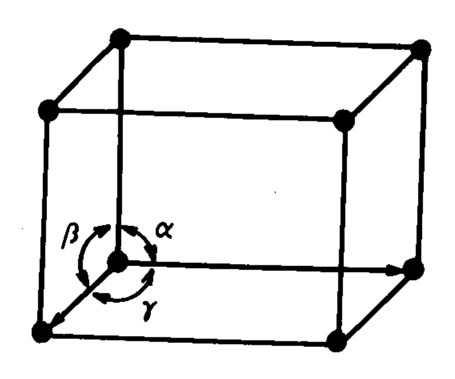
1 - 7 أشكال الشبيكة ذات ثلاثة الأبعاد

فيما مضى نوقشت اشكال الشبيكة في بعدين فقط اما الان فسوف نتطرق الى الشبيكات ذات ثلاثة الابعاد والتي تتمثل بالمعادلة التالية

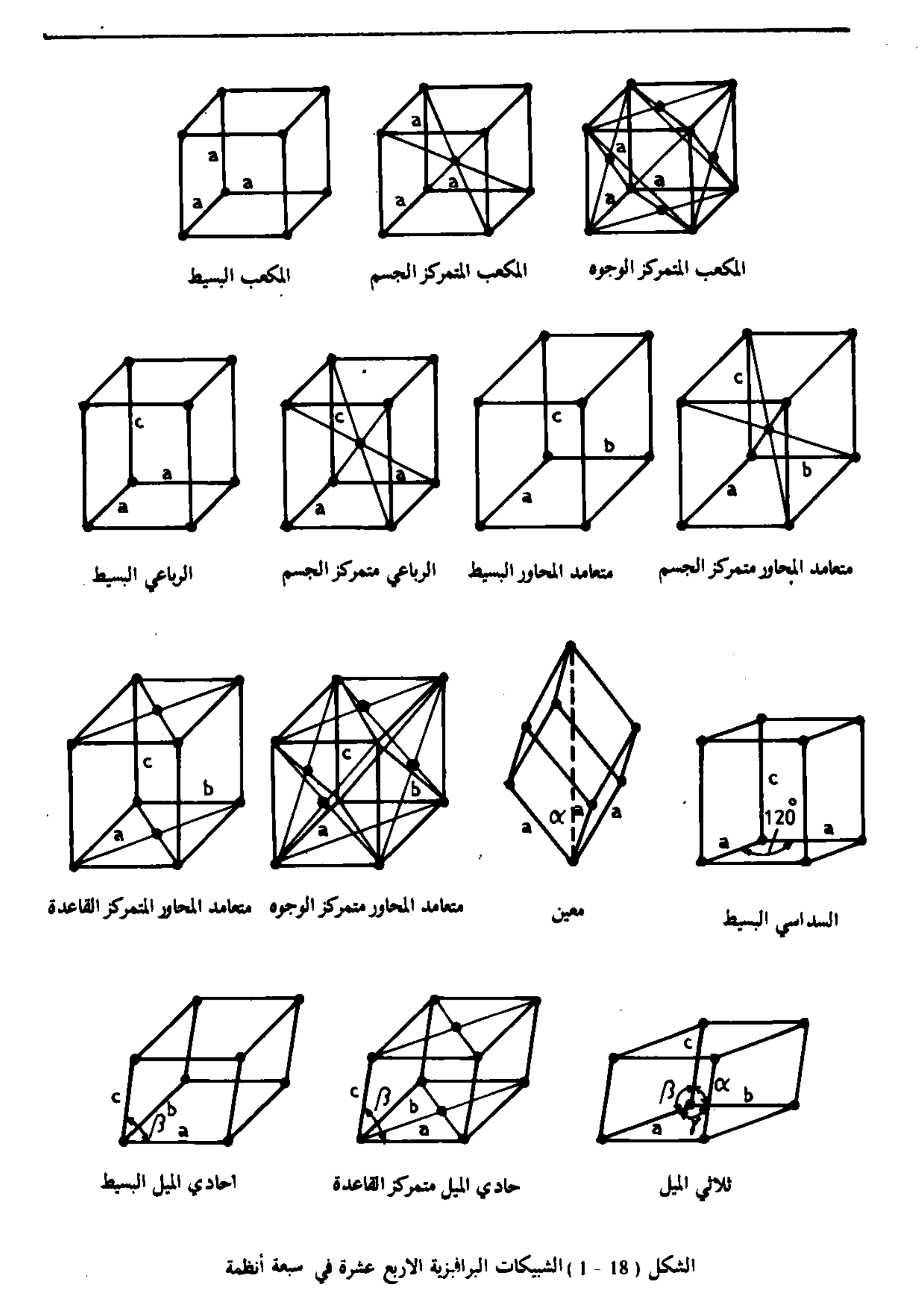
$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad \ldots (1\text{-}8)$$

حيث $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ثلاثة متجهات اساسية تبدأ من نقطة الاصل اما n_1, n_2, n_3 هي اعداد صحيحة تعتمد قيمة كل منها على اختيار مكان نقطة الاصل في الشبيكة ونأخذ $(n = 0, \mp 1, \mp 2 + \ldots)$

يمكن تحديد وحدة الخلية بواسطة المتجهات الاساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ وكذلك الزوايا المحصورة بين هذه المتجهات ولتكن α و β, γ كما موضح في الشكل (17-1) . لقد وجد ان الشبيكات البرافيزية في ثلاثة ابعاد تحتوي على ١٤ شكلا موضحة في الشكل (18-1) . اما الشبيكات غير البرافيزية فقد تصل الاشكال فيها الى 230 شكلا ان الشبيكات الاربع عشرة البرافيزية تتجمع في سبعة انظمة بلورية كما في الجدول 2-1



الشكل (17 - 1) وحدة الخلية في ثلاثة أبعاد



الشكل (18 - 1) الشبيكات البرافيزية الاربع عشرة في سبعة أنظمة

الجدول 2-1

النظام		الاطوال المحورية والزوايا	الشبيكة البرافيزية	رمز الشبيكة	الامثلة
1-	المكعب cubic	المحاور الثلاثة متساوية البعد ومتعامدة مع بعضها $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma$	البسيط متمركز الجسم متمركز الوجوه	P I F	NaCl CaF_2 $NaClO_2$
2-	الرباعي Tetragonal	المحاور الثلاثة متعامدة ولكن اثنان منها متساويان في البعد $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90$	البسيط المتمركز لجسم	P I	$NiSiO_4$ SnO_2
3-	متعامد المحاور Orthorhombic	المحاور الثلاثة غير متساوية ومتعامدة مع بعضها $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90$	البسيط متمركز الجسم متمركز القاعدة متمركز الوجوه	P I C F	KNO_3 $BaSO_4$ $MgSO_4$
4-	ثلاثي الميل Trigonal	المحاور الثلاثة المتساوية متمايلة بزوايا متساوية $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90$	البسيط	P	$CaSO_4$
5-	السداسي Hexagonal	محوران متساويان في نفس المستوى والزاوية بينهما 120 والمحور الثالث يعمل زاوية قائمة $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90, \gamma = 120$	البسيط	P	SiO_2 AgI
6-	احادي الميل Monoclinic	المحاور الثلاثة غير المتساوية واثنان منها متعامدان $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90 \neq \beta$	البسيط متمركز القاعدة	P C	Na_2SO_4 $K_2Cr_2O_7$
7-	ثلاثي الميل Triclinic	المحاور الثلاثة غير متعامدة والزوايا بينهما غير متساوية $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$	البسيط	P	

8 - 1 موضع واتجاه المستويات في البلورات :

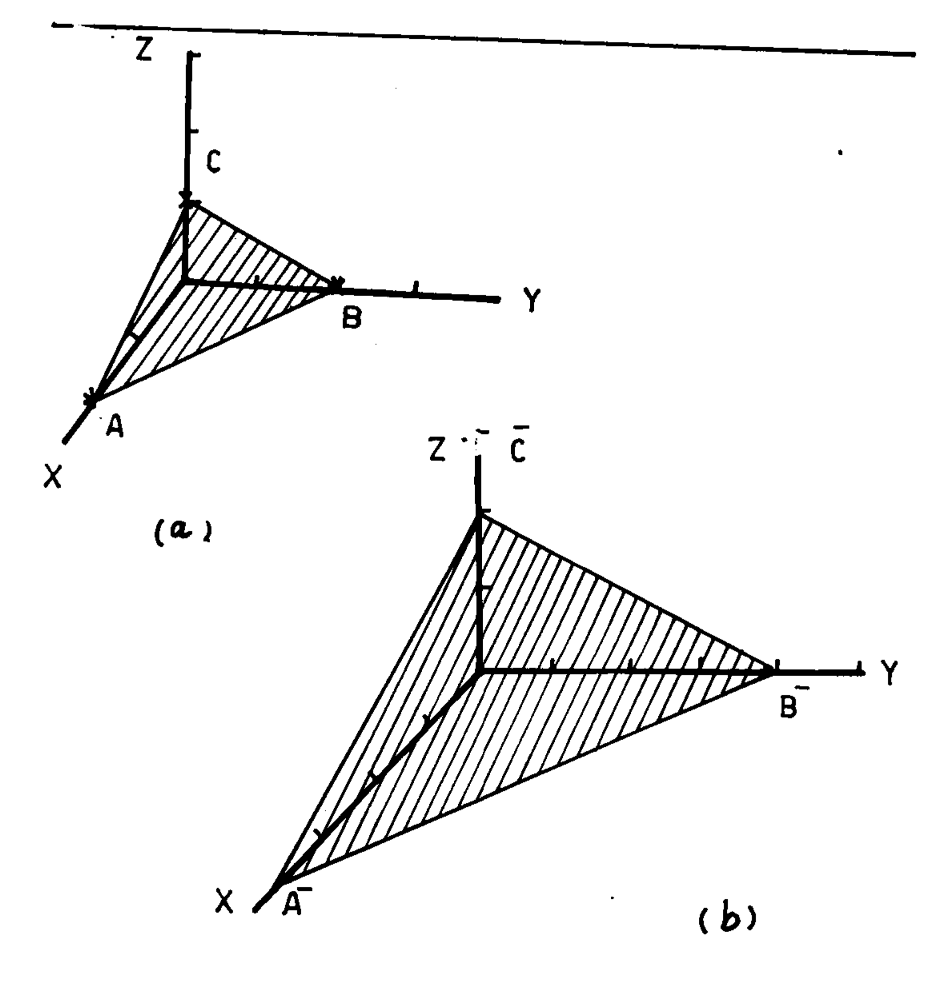
يمكن تعيين كل من موضع واتجاه اي مستوفي شبيكة البلورة بثلاث نقاط بشرط الا تقع هذه النقاط الثلاث على خط مستقيم واحد . واذا وقعت كل نقطة من النقاط الثلاث على احد محاور البلورة فانه يمكن تحديد موضع المستوى باعطاء احداثيات النقاط الثلاثة والتي تعطى بدلالة ثوابت الشبيكة . فمثلا لو كانت احداثيات النقاط الثلاث هي (4, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 2) بالنسبة للمتجهات المحورية ونقطة اصل ما ، فانه من الممكن تحديد المستوى بنقاط التقاطع (4, 1, 2)

لقد وجد العالم الانكليزي ملر (Miller) في عام 1800 انه من المفيد تحديد ميل المستويات بمعاملات والتي يمكن تعينها كما يلي :

1 - تعيين اطوال المسافات المقطوعة من المحاور الاساسية الثلاثة بدلالة ثابت الشبيكة وهذه المحاور قد تكون بدائية او غير بدائية ولتكن $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$

2 - ناخذ مقلوب هذه الاعداد ونختزلها الى اعداد صحيحة بشرط ان يكون القاسم المشترك بينهما مساويا الى واحد . فيكون الناتج حينئذ هو معاملات ملر (idices Miller) ويرمز له بـ(hkl) ويوضع داخل الاقواس العادية . ولتوضيح ذلك لاحظ الشكل (1-19a) ان نقاط تقاطع المستوي المظلل مع المحاور هي 2 باتجاه x - و 2 باتجاه y - و 1 باتجاه z - وبذلك يمكن التعبير عن المستوي بنقاط التقاطع (2, 2, 1) . اما بدلالة معاملات ملر فلناخذ مقلوب نقاط التقاطع $\left(\frac{1}{2} : \frac{1}{2} : 1\right)$ ثم نضرب هذه المعاملات العددية باصغر عامل مشترك هو 2 حيث تتحول هذه الاعداد الى اعداد صحيحة هي (112) وبنفس الطريقة فان نقاط تقاطع المستوي $A'B'C'$ في الشكل (1.19b) هي 4 و 4 و 2 باتجاه المحاور الثلاثة x و y و z على التوالي وعليه فان معامل ملر بهذا المستوى يكون $\left(\frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{2}\right)$ اي (112) وهذا يعني ان المستويين يرجعان الى المجموعة نفسها .

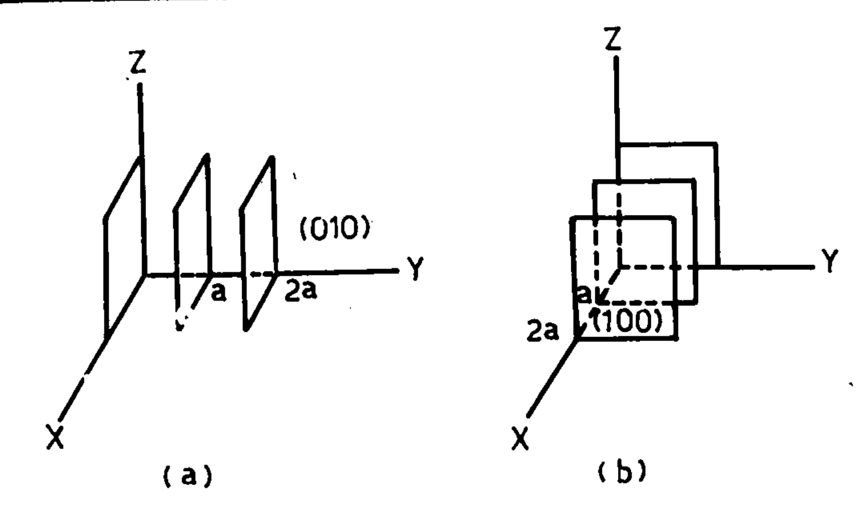
وترمز عادة معاملات ملر الى مستوى واحد او مجموعة من المستويات المتوازية . اما اذا قطع المستوى احد الاحداثيات في الجهة السالبة للمحور فان طول المحور المقطوع يكون سالبا ويرمز لمعامل ملر المناظر بلاشارة السالبة . ومثال على ذلك هو ($h\bar{k}l$) حيث قطع المحور y باتجاه السالب .



الشكل (19 - 1) مستويان لهما نقاط تقاطع مختلفة ونفس معامل ملر (112)

ان الشكل (1 - 20a) يوضح مجموعة من المستويات العمودية على محور Y ولها معاملات ملر (010) وبالطريقة نفسها نرمز للمستويات العمودية على محور x بـ(100) كما هو مبين في الشكل (1 - 20b) .

ان اوجه المكعب للشبيكة البلورية المكعبة بدلالة معاملات ملر هي (100) و (010) و (001) و (1'00) و (01'0) و (001') . والشكل (1 - 21) يوضح مجموعة من المستويات بدلالة معاملات ملر



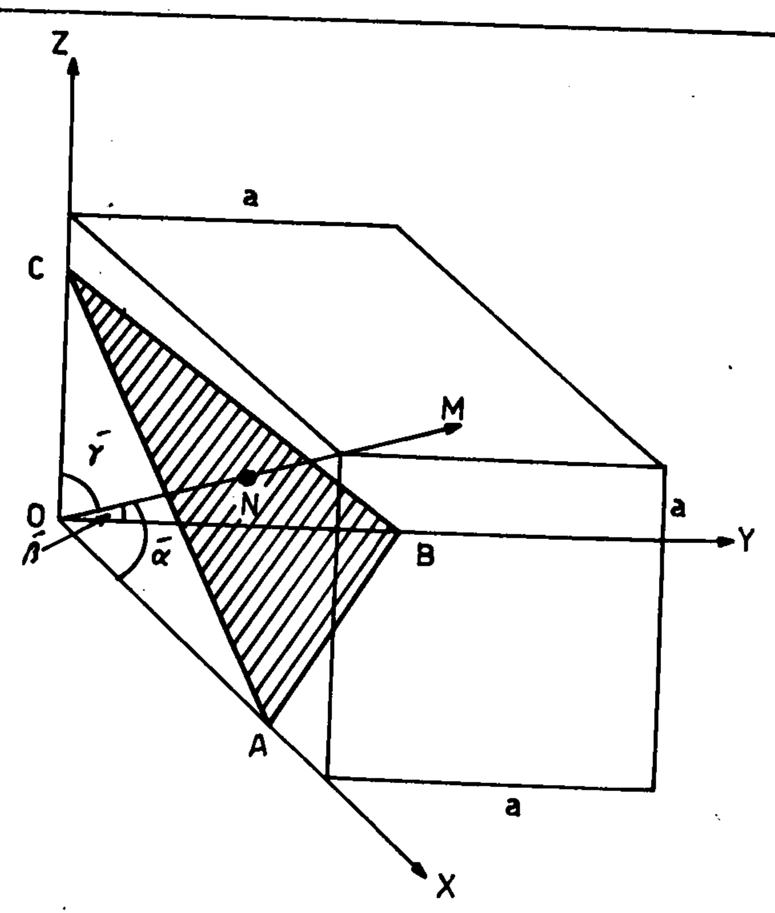
الشكل (20 - 1) (a) مجموعة من المستويات العمودية على محور Y
(b) مجموعة من المستويات العمودية على محور x

(222)　(110)　(111)

(200)　($\bar{2}00$)

الشكل (21 - 1) معاملات ملر لمجموعة من المستويات المهمة في الشبيكة المكعبة

لايجاد العلاقة بين المسافة البينية d_{hkl} لمستويات ملر وثابت الشبيكة a (ضلع المكعب)، نفرض ان المستوى المظلل في الشكل(22 - 1)له معاملات ملر(hkl)ان العمود



شكل(22 - 1)خلية مكعبة ضلعها(a) المستوى ABC ترجع الى مجموعة من المستويات لها معامل ملر (hkl)
و ON عمود على المستوى ABC

ON من نقطة الاصل على المستوى المظلل يمثل المسافة البينية d_{hkl} لهذه المجموعة من المستويات وبذلك يكون اتجاه جيب تمام للعمود ON هو $\cos\gamma'$, $\cos\beta'$, $\cos\alpha'$ وتقاطع المستوى المحاور الثلاثة كما يلي :

$$OA = \frac{a}{h}$$

$$OB = \frac{a}{k}$$

$$OC = a/l$$

وبذلك يكون

$$\cos \alpha' = \frac{d}{OA} = \frac{d}{a/h} = \frac{dh}{a}$$

$$\cos \beta' = \frac{d}{OB} = \frac{d}{a/k} = \frac{dk}{a}$$

$$\cos \gamma' = \frac{d}{OC} = \frac{d}{a/l} = \frac{dl}{a}$$

عندما تكون d (d=ON) المسافة العمودية بين المستويات المتوازية لهذه المجموعة من المستويات فأن

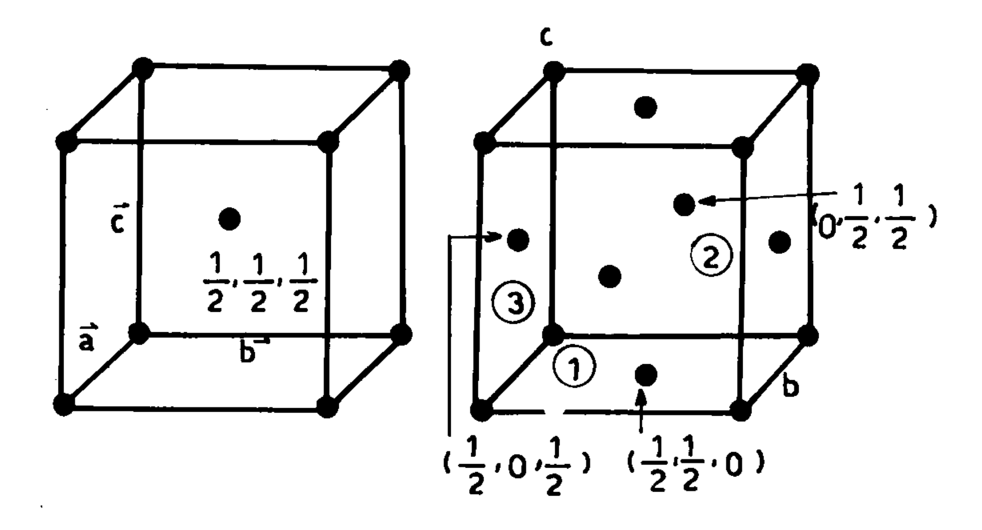
$$\cos^2 \alpha' + \cos^2 \beta' + \cos^2 \gamma' = 1$$

وعليه

$$\left(\frac{dh}{a} \right)^2 + \left(\frac{dk}{a} \right)^2 + \left(\frac{dl}{a} \right)^2 = 1$$

$$\frac{d}{a} (h^2 + k^2 + l^2) = 1$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \ldots (1-9)$$



الشكل (23 a1) يوضح احداثيات نقطة الشبيكة المركزية في خلية متمركز الجسم هي $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ بدلالة المحاور الثلاثة و (b) يوضح احداثيات النقاط التي تتوسط سطوح وحدة الخلية متمركز السطوح هي $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right),\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$.

اما بالنسبة لاتجاه المستويات داخل الشبيكة البلورية فانها تحدد ايضا بثلاث معاملات ولكن في هذه الحالة توضع بين قوسين مربعين وتاخذ الصيغة [hkl] ففي الشبيكات المكعبة اتجاه احداثي X يعبر عنه ب [100] واحداثي Y ب [010]

يمكن تعين نقطة ما داخل الخلية بدلالة المحاور (x_j, y_j, z_j) حيث كل محور من هذه المحاور يمتلك جزءا من المتجهات الاساسية $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ للبلورة . وان احداثيات النقطة المركزية في خلية مكعب متمركز الجسم (bcc) هي $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$. اما احداثيات النقاط التي تتوسط سطوح خلية مكعب متمركز السطوح Fcc هي $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$ و $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ و $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ والتي تعود للمستويات ① ② ③ كما في الشكل (23 - 1)

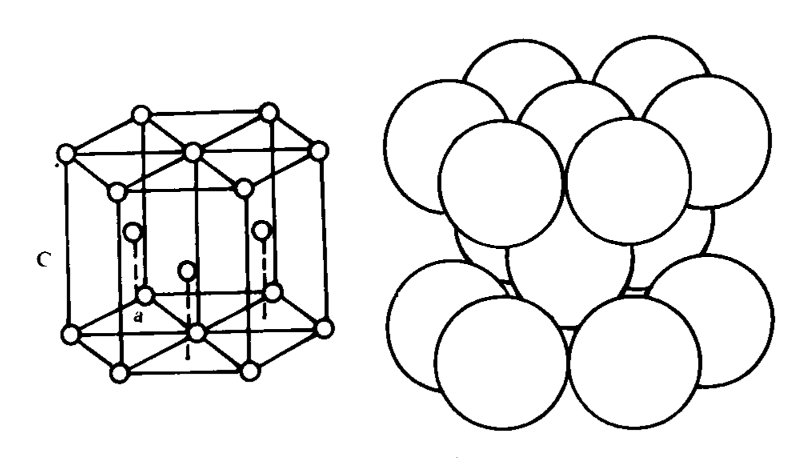
1 - 9 بعض التراكيب البلورية البسيطة :

1 - 9 - 1 تركيب متلاصق الرص

لنفرض أن الذرات الموجودة داخل المادة الصلبة تشبة كرات صلدة فأن هناك طريقتين لترتيب هذه الكرات المتشابهة بحيث يكون الفراغ المحصور بينها اقل ما يمكن

الطريقة الاولى:وهي تؤدي الى تركيب له تناظر نظام المكعب وهو تركيب المكعب المتمركز الاوجة أو مكعب متلاصق الرص (cubic Close Packed) .

الطريقة الثانية : فهي تؤدي الى تركيب ينتمي الى الفصيلة السداسية من حيث التناظر, ويعرف بالتركيب السداسي متلاصق الرص (Hexagonal - Close - Packed) كما في الشكل (1-24) .



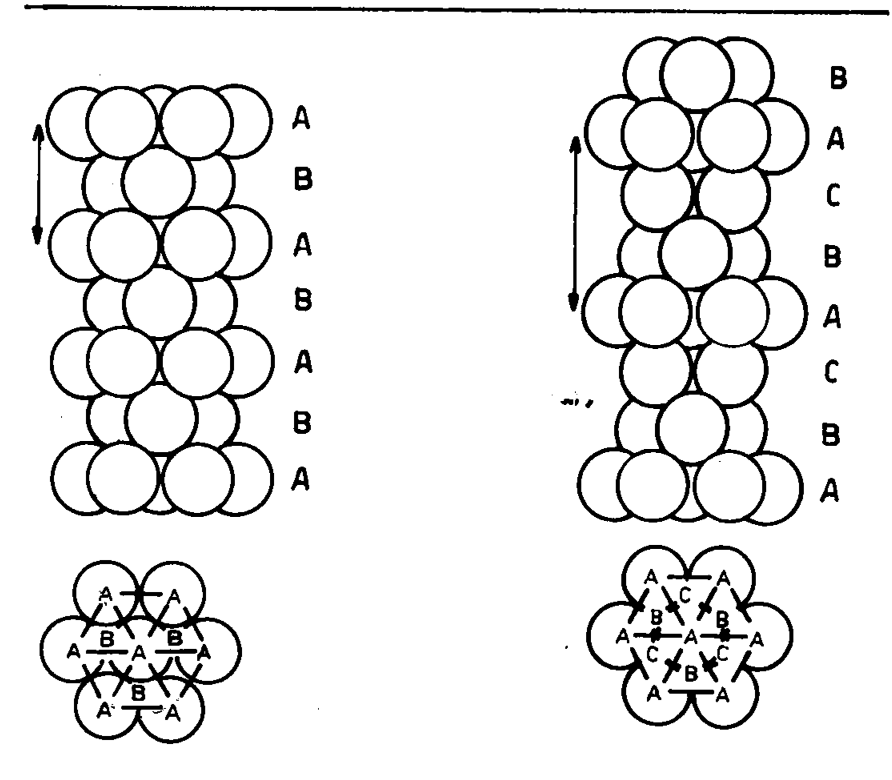
الشكل(24 -1) التركيب السداسي المتلاصق الرص

من الشكل (1-25) نلاحظ ان كل كرة في الطبقة الارضية تلامس ست كرات اخرى تحيط بها . وتتكون الطبقة الثانيةبالكيفية نفسها حيث توضع فوق الطبقة الارضية بشرط أن تلامس كل كرة فيها ثلاث كرات من الطبقة الارضية . لاحظ الشكل (1-25)

أن الفراغات الموجودة بين كرات الطبقة الارضية يرمز لها ب C , B. الان لتكن كرات الطبقة الثانية على مواضيع B . وعند وضع الطبقة الثالثة على الطبقة الثانية هنـــاك احتمالين لترتيب الطبقة الثالثة .

الاحتمال الاول : أن توضع كرات الطبقة الثالثة فوق الفراغات (C) الموجودة بطبقة الاولى أي أن التتالي يكون من الاسفل الى الاعلىABC,ABCوهذا يعطي الترتيب المكعب المتراص .

اما الاحتمال الثاني : أن توضع كرات الطبقة الثالثة فوق كرات الطبقة الاولى أي موضع A ويكون التتالي ABA, ABA وهكذا يتكون التركيب السداسي المتلاصق الرص (hcp) . الشكل (25-1) يبين كلا التركيبين . .



الشكل (25 - 1)المقارنة بين تركيب المكعب المتلاصق الرص والسداسي المتلاصق الرص

ان وحدة الخلية في التركيب السداسي المتلاصق الرص hcp هي خلية بدائية وتحتوي الاساس فيها على ذرتين احداثيتها 0,0,0 و $(\frac{3}{2},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$ ونسبة بين طول الاحداثين $\frac{c}{a}$ في السداسي المتلاصق الرص المثالية هي 1·633 وقد تختلف النسبة عن هذه القيمة . هذا التركيب شائع في المعادن مثل Ni , Mg , Zn , Ti, Cd .

2 – 9 – 1 تركيب بلورة كلوريد الصوديوم

ان التركيب المفترض لبلورة ملح الطعام هو NaC*l* وشبيكة هذه البلورة من نوع مكعب متمركز الاوجه FCC وعلى شكل بحيث تتبادل ذرتا الصوديوم والكلور اماكنها على امتداد المحاور الاساسية :

كما هومبين في الشكل (1-26a) . اما الشكل (1·26b) فيبين وحدة الخلية في ثلاثة ابعاد ويتكون الاساس من ذرة الصوديوم وذرة كلور تفصلهما مسافة قدرها نصف قطر الوحدة المكعبة وتحوي وحدة الخلية أربعة جزئيات أحداثيات ذراتها هـــي :

احداثيات ذرات الصوديوم .

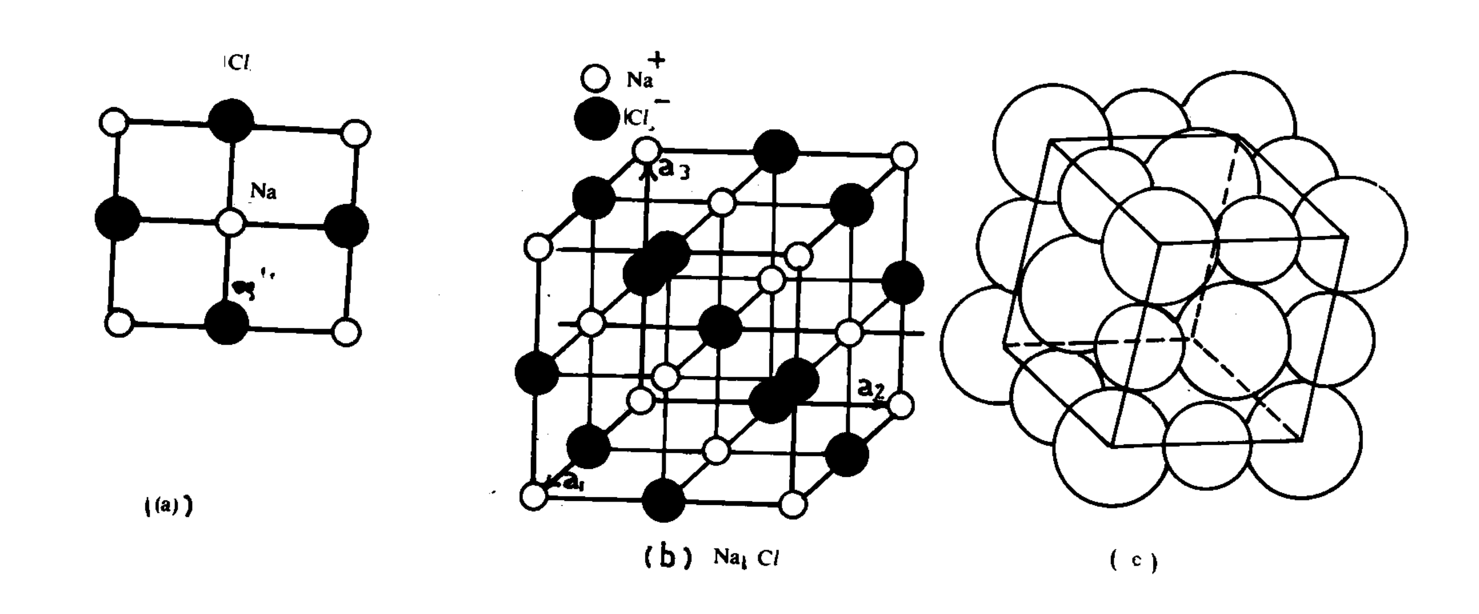
$$: 0 \;,\; 0 \;,\; 0 \qquad \frac{1}{2} \;,\; \frac{1}{2} \;,\; 0 \qquad \frac{1}{2} \;,\; 0 \;,\; \frac{1}{2}$$

$$0 \;,\; \frac{1}{2} \;,\; \frac{1}{2}$$

و احداثيات ذرات الكلور .

$$: \frac{1}{2} \;,\; \frac{1}{2} \;,\; \frac{1}{2} \qquad 0 \;,\; 0 \;,\; 0 \qquad 0 \;,\; \frac{1}{2} \;,\; \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{2} \;,\; 0 \;,\; 0$$

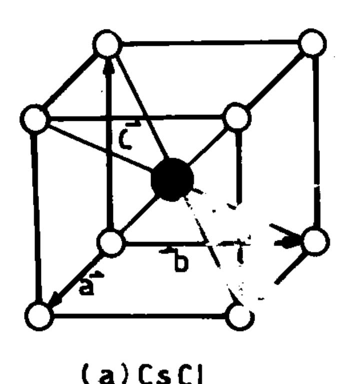


الشكل(26 - 1) (a) تبادل متناوب بين ذرتي Na و Cl في بعدين
(b) وحدة الخلية لبلورة كلوريد الصوديوم
(c) شكل توضيحي لترتيب ذرات في بلورة كلوريد الصوديوم

ويحيط بكل ذرة ست ذرات من النوع الاخر كاقرب جارات لها وعدد التوابط حينئذ يساوي ستة . وهناك 12 ذرة من نفس النوع من الذرات كجارات من الدرجة الثانية وبعبارة أخرى تعتبر شبيكة بلورة كلوريد الصوديوم هي شبيكة غير برافيزية مكونة من شبيكتين برافيزيتين متداخلتين أحداهما مكونة من ذرات Cl والاخرى من ذرات Na والشبيكتان منزاحة احداهما على الاخرى بمقدار $\frac{1}{2}$ حيث a ثابت الشبيكية وهناك امثلة عديدة على هذا التركيب مثل كلوريد البوتاسيوم KCl وكبريتات الرصاص PbS

3 - 9 - 1 تركيب بلورة كلوريد السيزيوم

إن تركيب كلوريد السيزيوم (CsCl) البلوري يعود الى النظام المكعب . أن ذرات السيزيوم والكلور في هذا التركيب تتبادل اماكنها على الحاور بأتجاه أقطار المكعب . وهكذا فالبناء الشبيكي لوحدة الخلية هو من نوع متمركز الجسم BCC كما هو موضح في الشكل (27-1) .



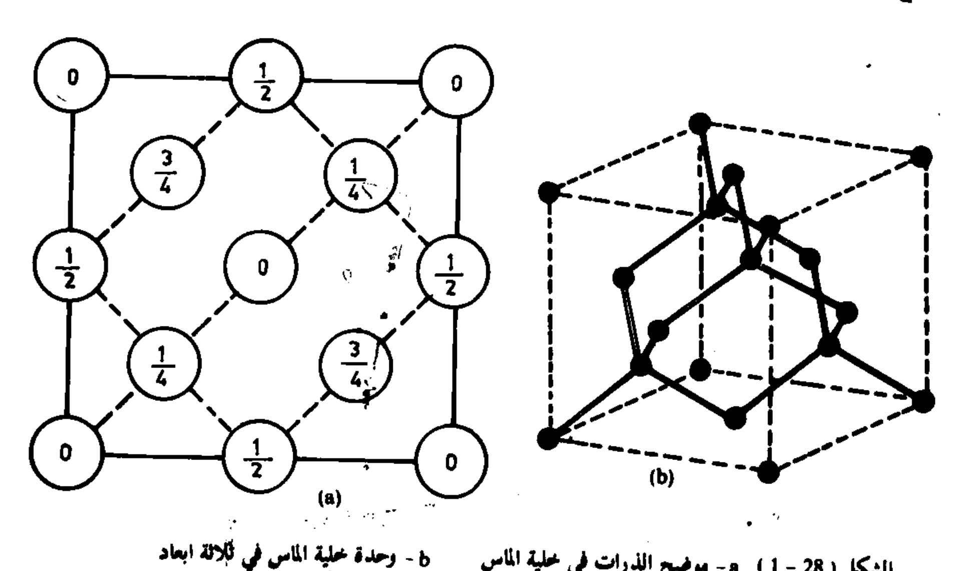
الشكل 27 - 1)تركيب كلوريد السيزيوم يتمثل ذرات السيزيوم أركان وحدة الخلية وذرة الكلور هي مركز وحدة الخلية

ان وحدة الخلية في هذا التركيب تحتوي على جزيئة واحدة . حيث تقع ذرة سيزيوم عند النقطة 0 0 0 وذرة كلور عند كلور عند النقطة $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$. لذا فأنها تعتبر شبيكة غير . برافيزية وتتكون من شبيكتين مكعبتين بسيطتيــن منزاحة كل واحدة عن الاخر باتجاه قطر المكعب بمقدار يساوي نصفه .

في هذا التركيب يقع ايون كلور Cl عند مركز المكعب . وتقع عند اركانه ثماني ايونات Cs^+ وبذلك يصبح عدد الترابط ثمانية هناك امثلة عديدة على هذا التركيب مثل CuZn ، CuPd , NH_4Cl , TiBr .

4 - 9 - 1 تركيب الماس

ان وحدة الخلية لهذا التركيب هي من نوع متمركز الاوجه FCC والاساس يتكون من ذرتين من الكاربون واحداثيات ذرتي الاساس هي 000 و$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ الشكل (1-28a) يبين منظرا ذا بعديــن للخلية . ان الخلية باكملها في ثلاثة ابعاد مبينة في الشكل (1·28b) ان هناك ثمانية ذرات لوحدة الخلية وكما نلاحظ من الشكل ان كل ذرة مجاورة باربعة ذرات وتكون هيكلا رباعيا منتظما ومركزه تلك الذرة وهذا التركيب شائع في اشباه الموصلات مثل الجرمانيوم (Ge) والسليكون (Si).



الشكل (28 - 1) a- موضح الذرات في خلية الماس b - وحدة خلية الماس في ثلاثة ابعاد

10 - 1 المواد الصلبة غير البلورية والسوائل

لقد حظيت المواد غير البلورية(Noncrystalline)باهتمام كبير في السنوات الاخيرة وذلك بعد اكتشاف بعض الخصائص الكهربائية للمواد شبه الموصلة غير البلورية والذي ادى الى استخدام هذه المواد في بعض الاجهزة الالكترونية والخلايا الشمسية .

ان المثال المالوف للمواد غير البلورية هو زجاج الشبابيك الاعتيادي والتركيب الكيمياوي لهذه المادة هو اوكسيد السليكون(SiO_2)والذي لا يمتلك تركيباً بلورياً منتظماً حيث ان ذرات السليكون والاوكسجين تبدو موزعة عشوائيا والمثال الاخر للتركيب غير البلوري هو السائل(liquid)حيث هذا النظام الذري لا يمتلك تركيباً بلورياً منتظماً ايضاً وتبدو الذرات في هذا النظام بانها موزعة بشكل عشوائي ان الذرات في السائل وان كانت تتحرك من منطقة الى اخرى الا ان النظام يحتفظ بتوزيع ذراته عشوائيا .

هناك تشابه كبير بين السوائل والمواد الصلبة غير البلورية رغم ان الذرات في المواد الصلبة غير البلورية ثابتة المواقع ولا تتحرك كما هو الحال في السوائل وهذا يجعلنا نسمي المواد غير البلورية بالسوائل تحت التبريد(Suppercooled liquid). في الحقيقة اذا استطعنا ان ناخذ صورة انية للذرات في المواد الصلبة غير البلورية والسوائل فان النتيجة ستكون من حيث عشوائية الذرات متشابهة تماما . ولذا فمن الممكن استخدام نفس المعادلات الرياضية للتعبير عن كلا النوعين من المواد .

بالرغم من ان السائل يملك نظاما عشوائيا ولكن في الحقيقة يملك نوعا من الترتيب (order)ولكن هذا الترتيب لا يشبه الترتيب الموجود في المواد الصلبة البلورية . وعلى سبيل المثال لنتصور حالة الزئبق(Hg)والذي عادة يتبلور بتركيب سداسي المتلاصق الرص (hcp) عندما يكون المعدن في الحالة الصلبة حيث تكون جميع الذرات في مواقعها المنتظمة وكل ذرة محاطة بعدد من الذرات المجاورة القريبة ، وهي تحاط بجاراتها القريبة الاخرى . وهكذا ان جميع ذرات الزئبق تقع على مسافة محددة بالضبط من الذرة المركزية . عندما يسخن المعدن الى حد الانصهار فان الذرات لا تعود ثانية الى مواقعها ويتحطم التركيب البلوري . واذا نظرنا الى هذا النظام الذري واخذنا احد الذرات كمرجع نرى ان عدد الجارات القريبة الاولى والجارات القريبة الثانية لهذه الذرة وكذلك المسافات المحدودة بينها تبقى ثابتة في حالتها لسائل ضمن مدى صغير من المسافة كما هي في الحالة الصلبة . بالطبع وعند التكلم عن عدد الذرا تالمجاورة

القريبة الاولى والثانية نقصد في الواقع معدل العدد وليس العدد الحقيقي كما هو الحال في البلورات . لان العدد الحقيقي في السائل يتغير باستمرار نتيجة لحركة الذرات .

لذلك يبدو السائل يمتلك ترتيبا دورياً وان هذا الترتيب يصبح واضحا في حيود الاشعة السينية في السوائل . الا ان الشيء المهم في السوائل هو ان الترتيب يبقى محصورا ضمن عدد محدود . من الذرات المجاورة والمحيطة بالذرة المركزية . وكلما ابتعدنا من الذرة المركزية يصبح توزيع الذرات بالنسبة الذرة المركزية عشوائيا تماما . ولذا عادة يقال بان السائل يمتلك ترتيبا قصيرالمدى (short range order) فقط خلافا لما عليه الحالة في البلورات حيث تمتلك كلا الترتيبين قصير المدى وطويل المدى .

لقد عرفنا بان هناك بعض الترتيب في الحالة السائلة ، كل هذا فان القوى بين الذرات هي المسؤلة عن بقاء الترتيب في المواد الصلبة وتبقي فعالة حتى بعد انصهار الصلب وتحوله الى الحالة السائلة . واضافة لذلك فان التمدد الذي يرافق عملية الانصهار يكون عادة قليلا . لذا فان المسافة البينية والقوى بين الذرات يبقى تقريبا بالمقدار نفسه قبل انصهار البلورة والعنصر الجديد الذي يدخل هنا هو الطاقة الحركية للذرات الناتجة عن التسخين والتي تمنع الذرات من الاحتفاظ بمواقعها المنتظمة . ولكن القوى بين الذرات لا تزال قوية بما يكفي لتعطى ترتيبا جزئيا في السائل .

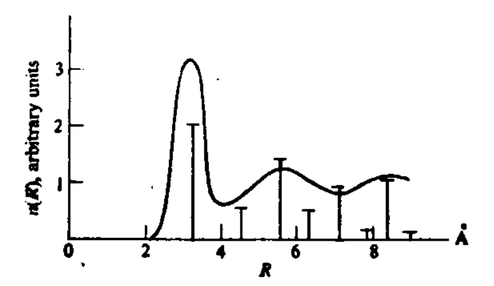
لنحاول المحاولة النظرية للمواد غير البلورية وناخذ ذرة معينة ونعتبرها كذرة مركزية لغرض دراسة توزيع الذرات الاخرى في النظام الذري بالنسبة لها . ان عدد الذرات في القشرة $\Delta N(R)$ الموجودة حول الذرة المركزية يتمثل بالعلاقة

$$\Delta N(R) = n(R)\, 4\pi R^2 \Delta R$$

حيث $n(R)$ هو تركيز الذرات في النظام وان المقدار $4\pi R^2 \Delta R$ هو حجم القشرة والذي حاصل ضربه بالتركيز يعطي عدد الجسيمات الموجودة في القشرة . (في السائل المتماثل بخواص Isotropic من الممكن اهمال التغير الزاوي للتركيز ويبقى التغير القطري هو المهم). بما ان خواص السائل متمثلة باكملها في التركيز $n(R)$ فلو استطعنا تحديد هذه الكمية ومقدار تغيرها مع المسافة القطرية فسوف نستطيع معرفة تركيب السائل تماما .

ان الشكل (29-1) يوضح علاقة التركيز $n(R)$ مع المسافة القطرية R في سائل الزئبق الناتج من حيود الاشعة السينية . ان المنحني يمتلك ذروة (pcak) ابتدائية عند

$R = 3A$ وبعدها يبدأ المنحني بالتذبذب عدة مرات قبل وصوله الى قيمة مستقرة كذلك كما نرى من الشكل ان $n(R)$ تصبح صفرا عندما تكون R اصغر من 2.2 انكستروم .



الشكل(29 - 1)تغير التركيز الذري $n(R)$ في سائل الزئبق مع R . ان الخطوط العمودية تدل على التوزيع الذري في الزئبق المتبلور .

ان خصائص المنحني يمكن ان يفهم على اساس القوى بين الذرات . فيمكن فهم تلاشي قيمة$n(R)$عندما تكون قيمة R صغيرة حيث انه عندما تقترب الذرات من الذرة المركزية اقترابا كبيرا تنشأ قوة تنافر كبيرة تدفع هذه الذرات بعيدا وتمنعها من التلاصق مع الذرة المركزية وهذا يوضح لماذا تكون $n(R) = 0$ عندما تكون $R = 0$ وهذا يعني ان قيمة R تقارب قطر الذرة عندما تكون$n(R) = 0$ اما ظهور الذروة الرئيسية في الشكل (1-29) فهو ناتج عن قوة التجاذب بين الذرات وسوف تتناقش هذا الموضوع في الفصل القادم حيث أن الذرات تجذب بعضها لبعض ضمن مسافات قريبة جداً . وهذه القوة تحاول جذب الذرات الاخرى نحو المركز وهذا بدوره يؤدي الى تجمع عدد كبير من الذرات عند مسافات معينة خارج مدى التناظر المذكور اعلاه . اما التغيرات الاخرى في المنحني فهي ناتجة عن التفاعل بين القوة الناشئة عن الذرة المركزية والقوى عن الذرات المجاورة المؤثرة على الجارات الاكثر بعداً .

عندما تزداد قيمة R يقترب التركيز $n(R)$ في قيمة ثابتة لتكن n_0 والتي هي في الحقيقة تساوي معدل التركيز للذرات في النظام . وهذه النتجة تكون متوقعة للسائل لانه لانه لايمتلك ترتيباً طويل – المدى . وهكذا فأن توزيع الذرات يكون عشوائياً تماماً عندما تكون R كبيرة ولاتعتمد قيمتها على اختيار موقع الذرة المركزية . . .

من المعتاد التعبير رياضاً عن كثافة الذرات $n(R)$ بأستعمال ما يدعي بدالة التوزيع الثنائي $g(R)$ (Pair distribution function) حيث أن :

$$g(R) = \frac{n(R)}{n_0}$$

فان هذه الدالة لها معنى الكثافة النسبية أو الاحتمالية ونظرا لان n_0 كمية ثابتة لذلك فان علاقة $g(R)$ مع R ستكون لها شكل $n(R)$ مع (R) أي الشكل (29-1) من الممكن ان نلاحظ عندما تقترب قيمة R من اللانهاية فان $g(R)$ تقترب من الصفر .

الأسئلة

1-1- عرف كــلاً من

أ – وحـدة الخليــة .

ب – الشبيكـــــة .

ج – معامــلات ملــر .

1-2 اذ ٔ علمت أن المتجهات الاساسية للشبيكة هي :

$$\vec{a} = \frac{a}{2} (i + j)$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2} (j + i)$$

$$\vec{c} = \frac{a}{2} (k + i)$$

حيث $\vec{k}, \vec{j}, \vec{i}$ هي وحدات الاتجاه الثلاث الاعتيادية . ما نوع الشبيكة البرافيزية .

1-3 إرسم وحدة الخلية لتركيب مكعب البسيط ثم بين المستويات الاربعة (111) فيها. ما هو عدد الذرات الموجودة في خلية المكعب البسيط و الخلية المتمركز الاوجه وخلية المتمركز الجسم

1-4- إرسم رسماً تخطيطياً لتركيب بلورة كلوريد الصوديوم(Na Cl). وبواسطتة وضح العبارات التالية (a) ثابت الشبيكة (b) المسافة ألبينية للمستويات . . .

1-5 (a) وضح عمليات التناظر Symmitry Operation في تركيب البلورات ثم بين تحليلياً بان المستويات (111) عمودية على الاتجاه [111] في مكعب بسيط . (b) برهن ان الشبيكة ذات البعدين لاتمتلك تناظراً ذا ٥- طيات .

1-6- جد معاملات ملرا M. للمستوي الذي تقاطعة a , $\frac{b}{2}$, 3c في خليــة مكعبــة .

1-7 - أن معدن النيكل (Ni) له تركيب من نوع مكعب متمركز الاوجه ونصف قطر الذرات هي 1.243×10^{-10} متر احسب المسافة البينية للمستويات و (200) . وَ(220)و (111)

1-8 - تصور أن لديك الخلية التقليدية من نوع المكعب المتمركز الاوجة . استنبط خلية مكعبة بسيطة (Sc) من هذه الخلية التقليدية الكبيرة ثم قارن بينهمامن حيث الحجم وعدد الذرات .

1-9 - برهن أن في التركيب السداسي المتلاصق الرص hcp حيث تتماسك الكرات الذرية مع بعضها ، أن نسبة $\frac{c}{a}$ هـي :

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3} \right)^{1/2} = 1.63$$

الفصل الثاني (٢)

الأواصر البلورية

2 - 1 المقدمة

تتكون المواد الصلبة من الذرات أو ايونات أو جزئيات متراصة بعضها مع بعض . وهذا التراص يعطي للمواد الصلبة الصفات الخاصة بها . إن الاواصر التساهمية (Covalent bonds) المسببة في تكون الجزئيات . موجودة أيضاً في بعض المواد الصلبة اضافة الى ذلك : الاواصر الايونية (Ionic bonds) واواصر فاندر فالز (vander waals bonds) والاواصر المعدنية (metalic bonds) تؤدي الى قوة الترابط في المواد الصلبة . والبلورات المتكونة هي اما بلورات ايونية او جزيئية اومعدنية حسب نوع التآصر الموجود بين جزيئات البلورة . سنتعرف في هذا الفصل كيفية تكوين الاواصر المختلفة ومميزات المواد الصلبة المتكونة نتيجة لهذه الاواصر .

2 - 2 طاقة الربط للبلورة وتصنيف المواد الصلبة

ان المادة الصلبة هي تركيب مستقر فمثلا بلورة كلوريد الصوديوم مستقرة اكثر من ذرات Cl , Na الحرة المكونة لهده البلورة . كذلك بلورة السليكون اكثر استقرارا من جمع ذرات السليكون الحرة وهذا يعني ان ذرات Si تجذب بعضها البعض عندما تصبح قريبة من بعضها وهذا بسبب وجود قوة تجاذب بين الذرات والتي تعمل على تماسك الذرات مع بعضها ان هذه القوة هي المسؤولة عن تكون البلورة وهذا يعني ان طاقة البلورة هي اقل من الطاقة الكامنة للذرات الحرة بمقدار يساوي مقدار الطاقة اللازمة لتفكيك البلورة الى مجموعة من الذرات الحرة وتسمى هذه الطاقة بطاقة الربط للبلورة (binding energy of crystal) . ولندرس الان كيفية تكون بلورة كلوريد الصوديوم . للحصول على ايون Na^+ من ذرة الصوديوم المعتدلة باخذ الكترون واحد منها وبذلك فاننا نحتاج الى طاقة قدرها 5.14 الكترون فولت .

وللحصول على ايون Cl^- من ذرة الكلور المعتدلة باضافة الكترون اليها وبذلك سوف تتحرر طاقة قدرها 3.61 الكترون فولت ويمكن تمثيل ذلك بالمعادلات التالية :

$$Na + 5.14eV \rightarrow Na^+ + e^-$$
$$e^- + Cl \rightarrow Cl^- + 3.61eV$$

وبذلك يكون مقدار الخساة نتيجة لنقل الالكترون من ذرة الصوديوم الى ذرة الكلور هو

$$5.14 - 3.61 = \rightarrow 1.53eV .$$

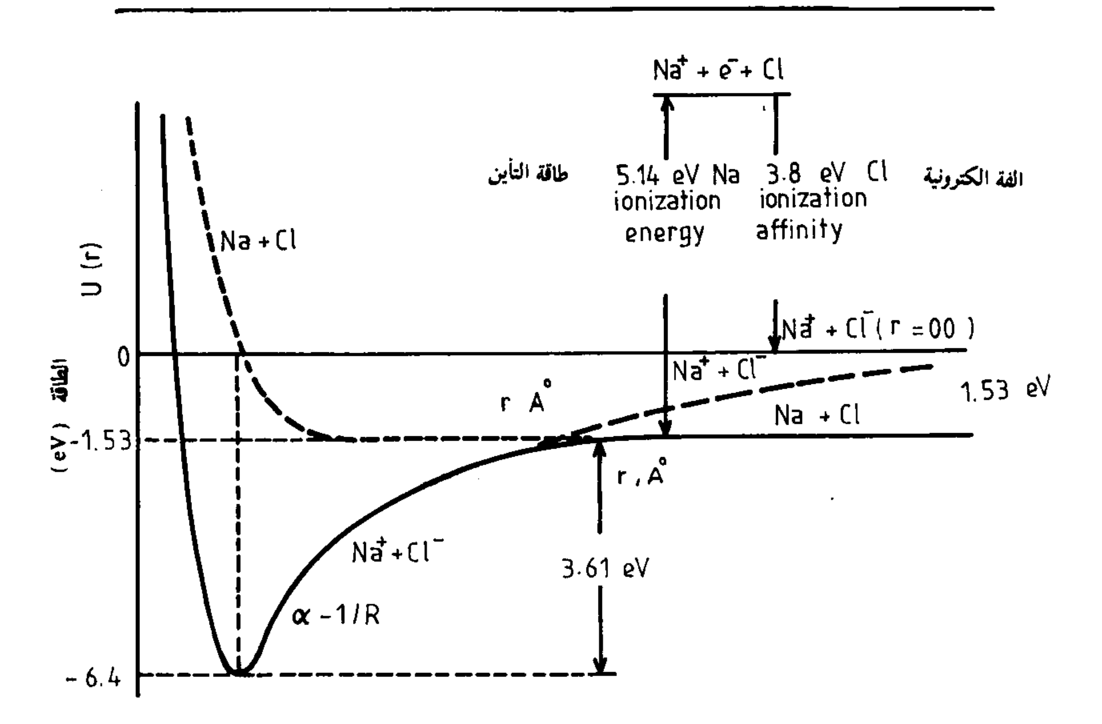
لنفرض الان ان ايون الصوديوم الموجب بعيد جدا من ايون الكلور السالب . فعندما يقترب هذان الايونان من بعضهما فان قوة تجاذب كهروستاتيكية ستنشأ بينهما وبذلك نحصل على طاقة كامنة سالبة نتيجة لهذا التجاذب كما هو موضح في المعادلة التالية

$$Na^+ + Cl^- \rightarrow (\text{صلب})\ NaCl + 7.9\ eV \qquad (\text{الطاقة المتحررة})$$

اي ان المجموعة تحرر طاقة نتيجة التجاذب عندما يصبح البعد بين ايونين ضمن مدى حوالي 2.8 انكستروم فتكون الطاقة المتحررة بحدود 7.9 الكترون فولت وهذه الطاقة اكبر من الخسارة في الطاقة 1.53 الكترون فولت الناتجة من ترابط الايونين في البدائية . ولذا فان حالة الترابط بين الايونين مفضلة من حيث الطاقة.

وعليه فان طاقة البلورة اقل من مجموع الايونات المتعادلة بمقدار 6·4=(3·6 +5·1−7·9) الكتروفولت . ولكن من الناحية العملية فان الطاقة التجريبية اللازمة لتفكيك جزيئة NaCl الى ذرتين منفصلتين هي 5·1 الكترون فولت .

ان الطاقة الكامنة التي تمثل التفاعل بين ذرتين تتغير بشكل كبيرمع المسافة بين الذرات كما هو موضح في الشكل (2·1).يتضح من الشكل ان الطاقة الدنيا لجزيئة كلوريـــد الصوديوم تكون عند r_0 حيث هي مسافة التوازن عندما تكون المسافة بين الذرتين اكبر من مسافة التوازن فان الطاقة الكامنة تزداد تدريجيا وتقترب من الصفر عندما تقترب المسافة من اللانهاية بينما عندما تكون المسافة اصغر من مسافة التوازن فان الطاقة الكامنة تزداد بشكل سريع جدا مقتربا من اللانهاية عندما تقترب المسافة من الصفـــــــر .



الشكل(1 - 2) تغيير الطاقة كالدالة للمسافة البينية(r)في جزيئة كلوريد الصوديوم

ان القيمة المثالية لمسافة التوازن r_0 تكون بحدود بضعة انكسترومات ولذا فان القوى هي في الحقيقة من نوع قصير المدى. ان انخفاض الجهد مع المسافة يكون شديداً بحيث لو تجاوزت المسافة 10-15A فيمكن اهمال القوة وبذلك نستطيع معاملة الذرات على انها حرة وغير مقيدة بالذرات الاخرى

يمكننا ايجاد القوة بين الذرات $F(r)$ من الجهد $U(r)$ وذلك باستخدام العلاقة التالية .

$$F(r) = -\frac{\partial U(r)}{\partial r} \qquad \ldots (2\text{-}1)$$

اي ان القوة هي الانحدار السالب (المشتقة السالبة للطاقة الكامنة مع المسافة) . فاذا طبقنا ذلك على المنحني في الشكل (2·1) نلاحظ انه $F(r) < 0$ عندما $r > r_0$ وهذا يعني انه عندما يكون $r > r_0$ تكون قوة تجاذبية محاولة بذلك جذب الذرات نحو بعضها . ومن جهة اخرى عندما تكون القوة $F(r) > 0$ اي عندما تكون مسافة التوازن اكبر من المسافة بين الذرتين فتكون القوة تنافرية وتحاول دفع الذرات بعيداً بعضها عن الاخر.

يتبين من هذه الدراسة ان القوى بين الذرات تتكون من جزئين . قوة تجاذبية وهي المتغلبة عند المسافات الكبيرة . اما قوة التنافر فتكون متغلبة عند المسافات القصيرة وتتعادل هاتان القوتان عند مسافة التوازن (القيمة العددية لمسافة التوازن من بلورة كلوريد الصوديوم هي 2·81 انكستروم)

ان الجدول (2-1) يبين لنا تصنيفا نوعيا لبعض الانواع الرئيسية من البلورات الصلبة وذلك بدلالة الاواصر الكيمياوية بين ذرات الجسم الصلب وجزيئاته مع رسومات توضيحية لكل نوع من انواع الاواصر

وفي البنود القادمة نشرح طبيعة التآصر المسؤولة عن تكوين كل نوع من انواع البلورات .

الجدول (١ – 2)

نوع البلورة	الامثلة	الرسوم التوضيحية
البلورات الايونيــة Ionic Crystal - 1	NaCl Lip	
البلورات التساهمية Covalent crystal - 2	Si Ge	
البلورات المعدنيــة Metalic crystal	Fe Na	
البلورات الجزيئية Molecciar crystal	Ar cystal Ice	

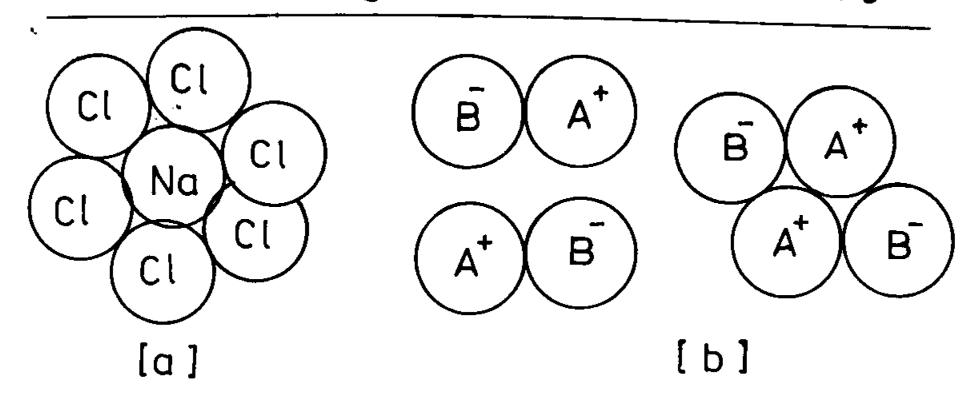
3 – 2 التآصر الايوني

يشتمل التآصر الايوني على ميكانيكية منح واكتساب الالكترونات بين الذرات المشاركة ليؤدي إلى تكوّن الايونات حيث تمركزالالكترونات بصورة رئيسية في المدارات الالكترونية الداخلية ويكون الترتيب الالـكتروني متشابهة لترتيب غازات الخاملة المعروفة. بتوزيعاتها الالكترونية المستقرة حيث تكون مداراتها الخارجية ممتلئة . ويتمثل قــوى التجاذب بين الايونات المتعاكسة الشحنة بدرجة كبيرة في الطبيعة الكهروستاتيكيــة

كما ذكرنا سابقاً ، واذا احذنا زوج ايونات Na^{+} , Cl^{-} فسنجد ان هناك قوة تجاذب كهروستاتيكي بين هذين الايونين المختلفي الشحنة . وهذه هي القوة المسؤولة عن ربط بلورة كلوريد الصوديوم والبلورات الايونية الاخرى . وهذا النوع من التآصر يتكون عادة من المركبات غير العضوية المعقدة مثل مركب KOH و LiF ولا يتكون في العناصر النقية .

بما ان المجال الكهربائي المستقر لاي من الايونين يمتد عادة الى جميع الاتجاهات فان عملية التجاذب لا تتوقف على هذين الايونين فقط بل تمتد الى ايونات اخرى حيث كل ايون صوديوم سيحاط بست ايونات كلور وبنفس الطريقة فان كل ايون كلور سيحاط بست ايون صوديوم كما هو موضح في الشكل(2-2)وتستمر هذه العملية وتؤدي الى تكوين بلورة كلوريد الصوديوم والذي يرجع الى نظام مكعب متمركز الاوجه هو المذكور في الفصل الاول .

وبصورة عامة يمكن القول انه عند تكون المركبات الايونية فان الايون الموجب (A^{+}) يتحد مع الايون السالب (B^{-}) لكي تتكون جزيئة (AB) كما هو موضح في الشكل (2-2b) وعند اقتراب اثنين من هذه الجزيئات مع بعضهما تتكون قوة التجاذب



الشكل(2 - 2)عملية تجمع الايونات في مركبات الايونية

بين الايونات المتعاكسة لكل من الجزيئتين وكذلك يتكون في الوقت نفسه قوة التنافر بين الشحنات المتشابهة $A^{+}-A^{+}$ و $B^{-}-B^{-}$. مثلاً . وبما ان قوة التنافر تعتبر صغيرة بالنسبة الى قوة التجاذب

لذلك فان عملية تجمع الايونات تستمر وتكون عنقود (cluster) . اما البلورة الايونية فتكون على شكل مجموعة من العناقيد الايونية حيث كل ايون موجب محاط بعدد من الايونات السالبة وكذلك كل ايون سالب محاط بعدد من الايونات الموجبة .واذا قيل لماذا لا تستمر ايونات الكلور والصوديوم بالاقتراب من بعضهما حتى يتم الانطباق الكلي بين الايونات البلـورة ؟ نقول : هناك صعوبة ، على اي حال ، لفهم اصل قوة التنافر المتكون في المسافات القصيرة والتي تمنع عملية الانطباق . فلوتصورنا ان الايونات مركب كلوريد الصوديوم قد اقتربت من بعضها بواسطة تقليل ثابت الشبيكة(a)عندئذ ستبدأ هناك قوة التنافر عند نقطة معينة ، والتي تمنع انهيار البلورة . فانه من الصعب تفسير قوة التنافر على اساس التفاعل الكهروستاتيكي ، وعليه يجب ان يكون منشأ هذه القوة نوع اخر من انواع التفاعل .

ان الصورة الوصفية لاصل قوة التنافر يمكن شرحها كما يلي : عندما يقترب ايوني الكلور والصوديوم من بعضها بما يكفي لتتداخل(overlap)مدارات الالكترونات في الايونين مع بعضها ، عندئذ تبدأ الالكترونات بالتنافر بعضها من البعض الاخر بواسطة قوة تنافر كهروستاتيكي . وكلما اقترب الايونان من بعضهما ازدادت قوة التنافر بسبب زيادة الالكترونات المشاركة في العملية . وهذا يتفق مع الشكل التخطيطي الموضح لعملية التفاعل بين الايونين والموضحة في الشكل (2·1)

وهناك مصدر اخر بنفس المقدار من الاهمية يساهم في قوة التنافر وهو اصل مبدأ الانفراد لباولي (Pauli exclusion principle) من اقتراب الايونين من بعضهما تتداخل مداراتهما الالكترونية ، وهذا يعني ان بعض الالكترونات تحاول اشتغال المدرات المشغولة مسبقا من قبل الالكترونات الاخرى . ولكن ذلك لن يسمح به طبقا لمبـدأ بـاولي . لان كـلا من ايـوني الصـوديـوم والـكـلـور تـكون اغـلـفـتـها الخارجيـة مليئة بالالكترونات كليا ولمنع التناقض مع مبدأ الانفراد لباولي ، فان الطاقة الكامنة للنظام تزداد بسرعة كبيرة وهذا ايضا يتفق مع الشكل التوضيحي(2·1)للمدى($r < r_0$).

ان الاصرة الايونية تكون قوية عندما تقارن مع اواصر اخرى حيث ان القيمة النموذجية لطاقة الربط لزوج من الذرات تقارب 5 الكترون فولت . وهذه القوة تعزى الى الشدة الكبيرة لقوة كولوم المسؤولة عن الربط والتي تجعل من البلورات الايونية ذات درجة انصهار عالية (ان درجة انصهار NaCl تساوي 801 درجة مئوية مقارنة بمعدن الصوديوم والذي درجة انصهاره 97·8 درجة مئوية)

2-3-1 النموذج الالكتروستاتكي للبلورات الايونية وحساب ثابت ماديلونك

لتوضيح هذا النموذج ناخذ ايونين لهما شحنات متعاكسة $-Z_1q$ و $+Z_2q$ ونعاملهما مبدئيا على اساس نقطتين تفصلهما مسافة r. لان الطاقة الكامنة لهذا النظام تاخذ الصيغة التالية :

$$U = -\frac{Z_1Z_2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \ldots (2\text{-}2)$$

حيث q تمثل الالكترون و ε_0 سماحية الفراغ وما الاشارة السالبة تعني ان الطاقة الكامنة ناتجة عن التجاذب . واذا اردنا حساب الطاقة الكامنة الكلية لبلورة كلوريد الصوديوم الموضحة في الشكل(1-26a)، ناخذ بنظر الاعتبار التفاعل بين جميع الايونات المكونة للبلورة وعليه فان المعادلة(2-2)تاخذ الصيغة التالية :

$$U = -\frac{AZ_1Z_2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad \ldots (2\text{·}3)$$

حيث A يمثل ثابتا لنوع التركيب ويعرف بثابت ماديلونك (Madelung Constant)

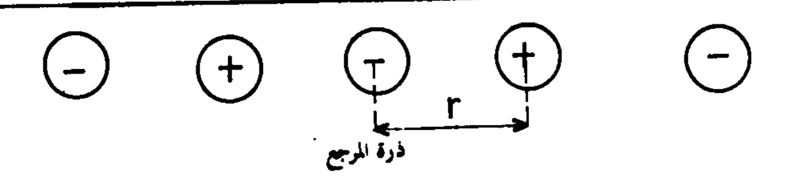
يمكن ايجاد ثابت ماديلونك عدديا في بعد واحد وذلك بفرض سلسلة طويلة من الشحنات الموجبة والسالبة بالتعاقب وبمسافات منتظمة ولكل منها شحنة مقدارها q وتفصل بينهما مسافة(r)كما هي موضحة في الشكل(2·3)وان احد الشحنات السالبة اعتبرت هي نقطة المرجع (refrence point) .

ان طاقة التجاذب بين نقطة المرجع واقرب جاراتها الاولى تساوي $-\frac{2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ اما طاقة التنافربين المرجع وجاراتها الاقرب الثانية فتساوي $+\frac{2q^2}{8\pi\varepsilon_0 r}$ ولكن طاقة التجاذب بينها وبين جاراتها الثانية هي $-\frac{2q^2}{12\pi\varepsilon_0 r}$ وبجمع هذه الطاقات نحصل على سلسلة من الحدود :

$$-\frac{2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left(1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{4}+\ldots\right) \quad \ldots (2\text{-}4)$$

بمقارنة هذه السلسلة مع السلسلة الرياضية

$$\ln(1+x) = x-\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{3}-\frac{4^4}{4}+\ldots$$



الشكل 3 - 2 : سلسلة من وحدات الشحنة المنفصلة بانتظام ذات الاشارة المتعاقبة .

نجد ان الاعداد بين الاقواس في المعادلة (2·4) تساوي ln2 لذا يمكن كتابة المعادلة (2·4) بالشكل التالي $\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ 2ln2

حيث العدد 2ln2 يمثل ثابت ماديلونك السلسلة من الايونات في بعد واحد .

لنحاول الان ان نجد ثابت ماديلونك في ثلاثة ابعاد وناخذ مرة ثانية بلورة كلوريد الصوديوم ونجعل ايون الكلور Cl^- كنقطة مرجع في وحدة الخلية نجد ان طاقة التجاذب بين هذه النقطة واقرب جاراتها الاول (ستة) تساوي $-\frac{6q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ ، اذا r تمثل المسافة ونجد ان طاقة التنافر بين هذه النقطة واقرب جاراتها الثانية (اثنى عشر ايون كلور) على حافات وحدة الخلية تساوي $+\frac{12q^2}{4\pi\varepsilon_0 r\sqrt{2}}$ اما قوة التنافر عن جاراتها القريبة الثالثة على حافات وحدة الخلية فتساوي $-\frac{8q^2}{4\pi\varepsilon_0 r\sqrt{3}}$ وهكذا وبكتابة هذه

الحدود على شكل سلسلة نحصل على

$$U = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left(6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \dots +\right)$$

ولذا فان ثابت ماديلونك يصبح

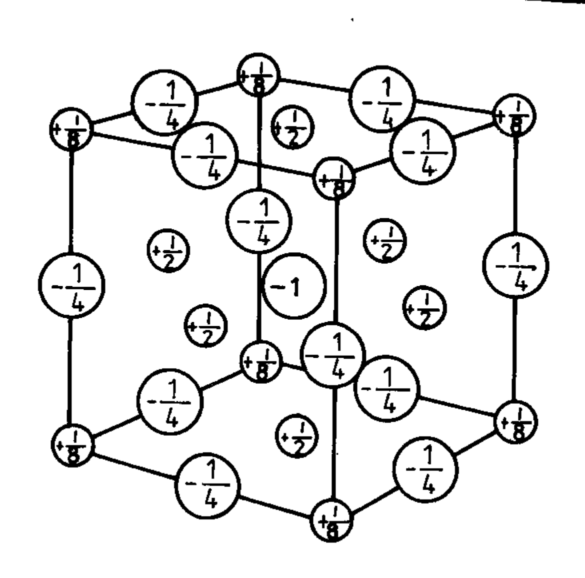
$$A = (6 - 8{\cdot}485 + 4{\cdot}619 - \dots +]$$

ان لهذه السلسلة سرعة تجمع بطيئة جدا . لقد وجد العالم ايفجن (H. M. Evjen) انه من الممكن زيادة سرعة تجمع السلسلة باستخدام مجموعات معادلة (groups nutral) من الايونات . ان الدافع الفيزياوي وراء استخدام فكرة المجموعات المتعادلة

هي ان الطاقة الكامنة للمجموعة المتعادلة تتناقص بسرعة اكبر مما عليه للمجموعة ذات الشحنة الظاهرة حيث ان الطاقة الكامنة بين ايون وايون اخر تتناسب مع $\frac{1}{r}$ بينما بين ايون ومزدوج قطبي تتناسب مع $\frac{1}{r^2}$ وبين مزدوج قطبي ومزدوج قطبي تتناسب مع $\frac{1}{r^3}$

لناخذ الان وحدة الخلية من نوع $NaCl$ وكما هوموضح في الشكل (2·4) على شكل مجموعة متعادلة من البلورة تتكون برص وحدات خلايا المكعب وجها لوجه نجد بذلك ان الايون الموجود في زاوية وحدة الخلية مشترك مع 8 وحدات خلايا متجاورة وعليه يساهم بـ $\frac{1}{8}$ شحنة لوحدة الخلية وبصورة مشابهة يساهم الايون في الحافة بنسبة $\frac{1}{4}$ والايون في الوجه بنسبة $\frac{1}{2}$. واذا جمعنا كل هذه الاسهامات نحصل على مجموعة متعادلة من $4Na^+, 4Cl^-$. وعليه فان الاسهامات الكلية للايونات لثابت ماديلونك يساوي

$$A = \frac{\frac{6}{1}}{1} - \frac{\frac{12}{4}}{\sqrt{2}} + \frac{\frac{8}{8}}{\sqrt{3}} = 1{\cdot}46$$



شكل (4 - 2)- تعين الشحنات الكسرية لبلورة $NaCl$ وفق طريقة ايفجن لحساب ثابت ماديلونك

اي ان ثابت ماديلونك يساوي 1·46 . واذا اخذنا مكعبا ضعف الحجم واتبعنا نفس الطريقة السابقة لايجاد ثابت ماديلونك فان القيمة التي سنحصل عليها تساوي 1·75 وهذه القيمة قريبة من القيمة الحقيقية 1·74756 = A لبلورة كلوريد الصوديوم

ويمكن حساب ثابت ماديلونك بطريقة اخرى : لنتصور الان ايونا ذا شحنة q في الفراغ او دخل في تركيب البلورة لمادة ما واحيط بغلاف كروي موصل وذلك لانه في كلا الوضعين يتعادل مجاله الكهربائي مع المجالات المحيطة به .

ان الجهد الالكتروستاتيكي الذي يعود الى الشحنة q وعلى مسافة r يساوي $\frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r}$ اما الشغل اللازم لتقليل الشحنة بمقدار δq يساوي $\frac{q\delta q}{4\pi\varepsilon_0 r}$. ولمعادلة الشحنة الكلية فان الشغل اللازم لكل ايون (W) يساوي :

$$W = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_0^{q} \left(\frac{q}{r} \right) dq \qquad \ldots (2\text{-}6)$$

او

$$W = \frac{0{\cdot}5\, q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad \ldots (2\text{-}7)$$

ان حجم غلاف كروي ذو نصف قطر r

$$V = \frac{4}{3} \pi r^3$$

لذا يمكن كتابة المعادلة (2-7) بالشكل :

$$W = \frac{0{\cdot}8060\, q^2}{4\pi\varepsilon_0 V^{1/3}} \qquad \ldots (2\text{-}8)$$

لنطبق هذه النتيجة على التركيب البلوري لكلوريد السيزيوم وكما هو موضح في الشكل (1-27) مركزين على وحدة خلية واحدة حيث حجم وحدة الخلية يساوي a^3 اذ ان a تمثل ثابت الشبيكة ولكن $a = 2r_0 / \sqrt{3}$ حيث r_0 تمثل مسافة الاتزان بين الايونات ولذا ..

$$V = \frac{8 r_0^3}{3\sqrt{3}} \qquad \ldots (2\text{-}9)$$

وبذلك فأن حجم الايون هو نصف هذه القيمة وعليه .

$$V^{\frac{1}{3}} = \frac{4^{1/3} r_0}{\sqrt{3}} \qquad \ldots (2\text{-}10)$$

وبذلك فـأن :

$$W = \frac{0.8795\, q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \qquad \ldots (2\text{–}11)$$

وعليه فأن الشغل اللازم لكل زوج أيون من كلوريد السيزيوم تساوي 2W بالتعويض عن قيمة q، r_0 في المعادلة (2–11) نحصل على ثابت ماد يلونك لـ CsCl يساوي 1·759 وهذه القيمه قريبة من القيمة التجريبية 1·7627. ان الجدول (2–1) يوضح ثوابت ماد يلونك التقريبية لبعض البلورات .

جدول (1 – 2) ثوابت ماديلونك وطاقات البلورة التقريبية لبعض التراكيب البسيطة .

	Z_1	Z_2	Z_1Z_2A	$-U$	for ρ / r_0
$\alpha - ZnS$	1	1	1·6407	684	K. J / mol.
$\beta - ZnS$	1	1	1·6381	683	K. J / mol.
TiO_2	2	1	4·770	1988	K. J / mol.
CaF_2	2	1	5·0388	2100	K. J / mol.

2 – 3 – 2 حساب طاقة البلورة

في البلورة الايونية تتمثل القوة الرئيسية بين الذرات بتجاذب الايونات ذات الشحنات المعاكسة ، وتنافر بين الايونات المتشابهة بينها وبين الكترونات الإغلفة الداخلية للذرات ويوضح هذه التأثيرات بطريقة وصفية بشكل (2–1) أن الطاقة الكامنة للتنافر تزداد بسرعة كبيرة مع تناقص r عند ما تكون أصغر من r_0. وبأخذ ثابت ماديلونك بنظر الاعتبار للتنافر الالكتروستاتيكي بين الايونات المتشابهة وبأخذ طاقة التنافر بشكل أسي $B \exp(-r/\rho)$ حيث يمثل B ثابتاً يعتمد على نوع البلورة ويمثل ρ قياساً لتركيب و البلورة فان طاقة البلورة بدلالة r تأخذ الصيغة التاليـــة :

$$U(r) = \frac{AZ_1Z_2\, q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + B \exp(-r/\rho) \qquad \ldots (2\text{–}12)$$

وللسهولة يمكننا اعادة كتابة المعادلة (2-12) بالشكل التالـــي :

$$U(r) = \frac{A'}{r} + B\exp(\alpha r) \qquad \ldots (2\text{-}13)$$

حيث

$$A' = -\frac{Z_1 Z_2 q^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

و

$$\alpha = \left(-\frac{1}{\rho}\right)$$

يلاحظ من الشكل (2-1) أن $U_{(r)}$ تكون أصغر ما يمكن عندما تكون $r = r_0$. بأخذ مشتقة المعادلة (2-13) نحصل على

$$\left.\frac{dU}{dr}\right|_{r=r_0} = -\frac{A'}{r_0^2} + \alpha B\exp(\alpha r) = 0 \qquad \ldots (2\text{-}14)$$

لـــذا :

$$B = \frac{A'}{r_0^2\,\alpha\exp(\alpha r_0)} \qquad \ldots (2\text{-}15)$$

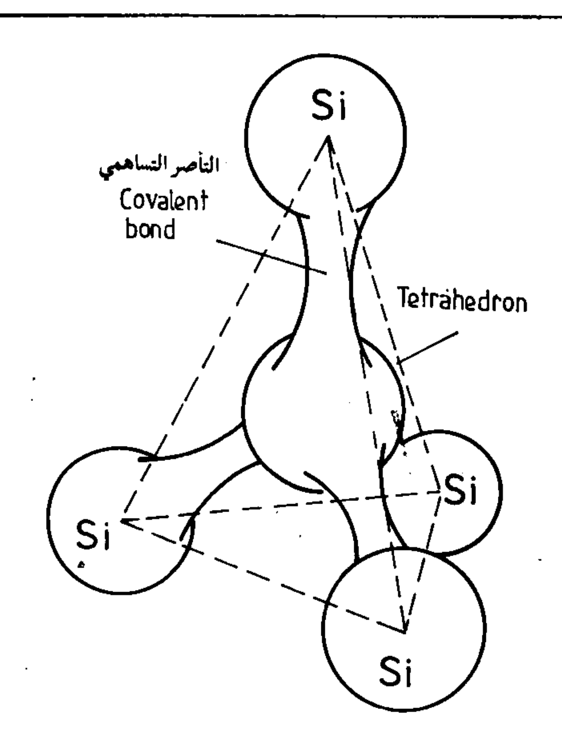
ومن المعادلتين (2-12) , (2-15) .

يمكن الحصول على الطاقة الكامنة للبلورة بوحدة الجول لكل مول بعد ضرب الطرف الايمن من المعادلة بثابت افوكادرو (N_A) .

$$U_{(r_0)} = -\frac{N_A A\, Z_1 Z_2 q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \frac{\rho}{r_0}\right) \qquad \ldots (2\text{-}16)$$

4 - 2 التأصر التساهمي :

ان قوى التماسك في البلورات التساهمية تنشأ من اشتراك الالـكترونات بين الذرات المتجاورة . فكل ذرة مشتركة باصرة تساهمية ، تساهم بالـكترون واحـــد او اكثـــر في عملية التآصر ويكون الالكترونات مشتركة بين الذرتين ، بدلاً من ان يعود اي من الالكترونات لاحدي الذرتين كما هي الحالة في التأصر الايوني . ويمكن فهم قوة التماسك الناتجة من هذا النوع من التأصر بواسطة ميكانك الكم . ويشكـــل السليكــون (Si) والكاربــون (C) والجرمانيــوم (Ge). امثـلة من هذا النوع من التأصر كما هو موضح في الشكل (2.5)



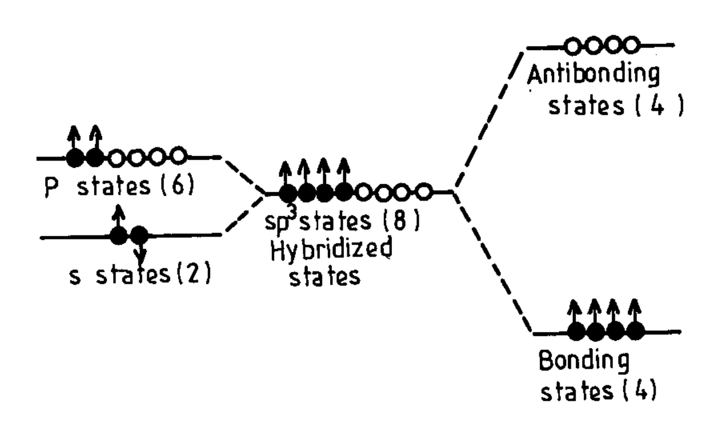
الشكل (5 - 2) التأصر الرباعي في بلورة السليكون

أن عملية التماسك في بلورة السليكون مثلاً تحدث بالطريقة التاليـــة .
كل ذرة من السليكون تمسك أربعة الكترونات تساهمية (Valence election) في مدارها

الخارجي حيث أن تركيبها الالكتروني هو : $Si^{14} = \underline{1s^2}\ \underline{2s^2\ 2p^6}\ \underline{3s^2\ 3p^2}$

ويمثل $3s^2\ 3p^2$ المدار الخارجي لذرة السليكون :

حيث تكون حالة s (s-state) مشغولة تماماً ، هذه الحالة تحتوي على الكترونين بعزم مغناطيس (magnetic moment) باتجاهين متعاكسين لاحظ اتجاه الاسهم في الشكل (2 - 6) بينما الحالة 3p تملك الالكترونين مع اربعة فجوات . عندما تقترب الذرتان في بعضهما فان الترابط الجزيئي ياخذ اقل مايمكن من الطاقة وذلك بتكوين حالات تآصر من نوع جديد ويعرف بالتآصر الهجيني من نوع (sp^3) ويشغل الالكترونات الاربعة هذه الحالات الجديدة .



الشكل (2 - 6) التغير في مستويات الطاقة للالكترونات التكافئية في السليكون

اما الفجوات فيجب ايضا ان تاخذ بنظر الاعتبار ، حيث ان الفجوات تكون مايسمى حالات ضديد التآصر Anti-bonding

اذا استطعنا أن نعطي كمية كافية من الطاقة للالكترونات لكي تشغل حالات ضديد التأصر ، فأن الالكترونات أنذاك تكون طليقة من حالات التأصر وتسطيع أن تسهم في التوصيلية الكهربائية وهذه الخاصية تكون مهمة جداً عند دراسة التوصيلية الكهربائية في الفصول القادمة .

تكون البلورات التساهمية عادة قاسية (hard) وهشة وغير قابلة للالتواء وهذه الحقيقة يمكن فهمها بأن الأواصر التساهمية تمتلك اتجاهاً محدداً في الفضاء فلذا فأن أي محاولة للتغيير تقاوم بشدة من قبل البلورة .

في البنود السابقة وعند دراسة التأصر الايوني والتساهمي أخذت البلورات على أنهاتمتلك نوعاً . واحداً من التاصر اما التأصر الايوني النقي أو التأصر التساهمي النقي . ولكن في الحقيقة هناك العديد من البلورات والتي تكون أواصرها غيرنقية تماماً بل هي خليط من الاواصر التساهمية والايونية والمثال المناسب هو مركب شبة الموصل جاليوم أرسينايد (GaAs). في هذا المركب تحدث عملية انتقال الالكترونات من ذرة الى أخرى ولكن ليس انتقالاً تاماً . حيث أن ٪ 46 من الالكترونات فقط تنتقل كمعدل من ذرة الجاليوم الى ذرة الارسينايد وهذا الانتقال يكون جزءاً من قوة الترابط في بلورة الجاليوم أرسينايد ولكن الجزء الاكبر هو بسبب التأصر التساهمي أو إشتراك الالكترونين بين ذرتين جاليوم وأرسينايد المتجاورتين .

5 – 2 التأصر المعدني

تنص النظرية الحديثة بأن الألكترونات التكافئية للذرات المكونة للمعدن تكون مشتركة بين جميع ذراته ، حيث ينتج ما يسمى (بغاز الألكترونات الحرة) .ويؤدي التفاعل بين غاز الألكترونات ولأيونات الموجبة الى قوة تماسك قوية . ان وجود الألكترونات الطليقة يفسر بصورة جيدة قابلية التوصيل الكهربائي والحراري للمعادن وعدم شفافيتها ولمعادن سطوحها والعديد من صفاتها الأخرى .

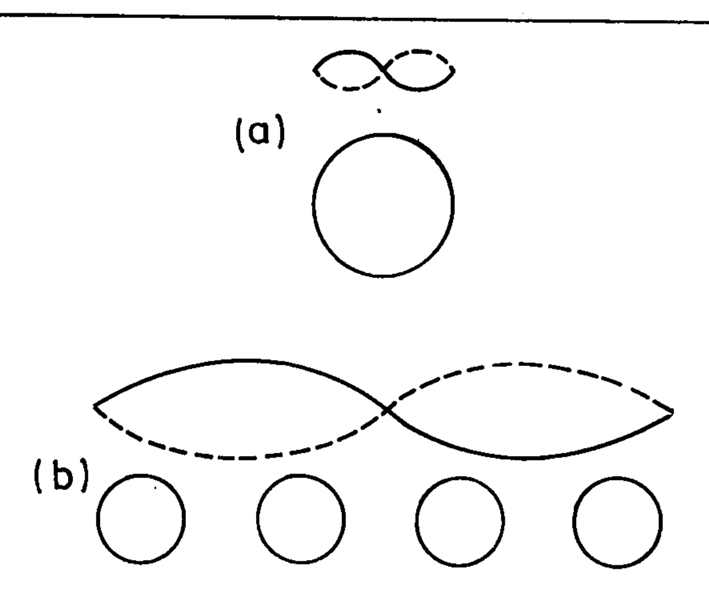
لكي نفهم التأصر المعدني لنأخذ معدناً مثالياً بسيطاً مثل الصوديوم . فكيف يمكن لمجموعة من ذرات الصوديوم أن تجذب بعضها البعض وتكون جسماً صلباً مستقراً بالرجوع الى البندين السابقين يتبين لنا أنه لا التأصر الأيوني ولا التأصر التساهمي يمكن أن يُفسر التجاذب بين ذرات الصوديوم . التفسير الصحيح للتجاذب بين ذرات الصوديوم هو أن كل ذرة صوديوم حرة تمتلك الكتروناً منها تكافؤيا حراً في مدارها الثالث ذو اعرتباط ضعيف مع الذرة . عندما تتكون البلورة ينفلت الألكترون من الذرة الأم ويصبح حراً في البلورة ، وتكون قابلة للحركة خلال البلورة . ان هذه

الصورة للألكترون التكافؤ تكّون غاز الألكترونات الحرة وهذا يختلف اختلافاً جذرياً عن الألكترونات التكافئية في الأصرة الأيونية والتساهمية ، حيث تكون الألكترونات مرتبطة بقوة مع الذرات الأم .

ان النموذج الذي بين أيدينا لبلورة الصوديوم هوتجمع أيونات الصوديوم الموجبة تكون شبيكة مكعبة متمركزة القاعدة (BCC) ، مغمورة في غاز الألكترونات الحرّة الناتجة من الألكترونات التكافئية . والسؤال الذي يواجهنا الآن هو لماذا تكون طاقة مثل هذا النظام (الشبيكة من أيونات الصوديوم الموجبة والألكترونات الحرة) اقل من نظام جمع ذرات الصوديوم الحرة ؟ اولاً ، من الواضح أن أيونات الصوديوم الموجبة سيتنافر بعضها مع البعض نتيجة للقوة الكهربائية المستقرة ، ولكن هذه القوة التي تعمل على عدم الأستقرارية غير فعّالة بدرجة كبيرة ، لأن الألكترونات الحرة تحجب الأيونات بعضها عن البعض الأخر فنتيجة لذلك تتكون أيونات متعادلة مشابهة بشكل كبير حالة الذرات الحرة المتعادلة . لذا فأن الطاقة البلورية الناتجة عن التآصر المعدني لا يمكن فهمه الاّ بأستخدام النظرية الكمية حيث حسب الأعتبارات الكمية أنه عندما تكون الجسيمة مقيدة في حجم صغير (مدار الذرة) يجب بالضرورة أن تمتلك طولاً موجياً قصيراً وطاقة حركية كبيرة (لاحظ الشكل 2 - 7a) . أن مصدر هذه الطاقة هو تماماً ذو طبيعة كمية وذو علاقة وثيقة بمبدأ هيزنبرغ لعدم التحديد Uncertainity principle ، حيث كلما يزداد فضاء حركة الألكترون يزداد طوله الموجي وتقل طاقته الحركية .

والأن لنطبق هذه الفكرة على حالة معدن الصوديوم . عندما تكون ذرات الصوديوم في حالتها الغازية ، فأن الألكترونات التكافئية فيها تمتلك طولاً موجباً قصيراً ولذا فأن طاقتها الحركية تكون كبيرة ضمن حيز ذرة الصوديوم بينما في الحالة البلورية تكون الألكترونات حرة لأنها تتجول خلال حجم البلورة والذي هو كبير جداً وهذا يسبب زيادة في الطول الموجي للألكترون ونقصاً كبيراً في الطاقة الحركية والذي بدوره يسبب نقصاً ملموساً في الطاقة الكلية للنظام والتي هي مصدر التآصر المعدني

ان الأصرة المعدنية هي أضعف من الأصرة الأيونية والتساهمية (على سبيل المثال درجة انصهار الصوديوم هي 97.8 C فقط) ولكنها تبقى بعيدة عن أن تكون صغيرة أو مهملة .



الشكل(7 - 2)العلاقة بين الزخم وطول الموجي للالكترونات التكافئية في التأصر المعدني
(a) ذرة واحدة بطول موجي قصير وزخم كبير
(b) مجموعة من الذرات بطول موجي طويل وزخم صغير

ان قابلية التوصيل الكهربائي العالي في البلورات المعدنية هو نتيجة لقابلية الالكترونات التكافئية على الحركة بسهولة تحت تأثير المجال الكهربائي مسببة تياراً كهربائياً بأتجاه المجال . ويمكن تعليل قابلية التوصيل الحراري بالطريقة نفسها اما الليونة العالية فهي نتيجة لحقيقة أن الأصرة المعدنية هي ليست اتجاهية(directional) كما هي الحالة في الأصرة التساهمية بحيث أنه عند تسليط قوة خارجية تغير الأيونات مواقعها للتكيف مع هذه القوة وبما أن الألكترونات صغيرة جداً وذات قدرة عالية على التحرك فأنها تكيف نفسها بسهولة على حالة التشوة الجديد للأيونات .

ان هذا النموذج للتآصر المعدني يعمل جيداً في المعادن البسيطة وعلى الأخص القلويات . اما المعادن المعقدة اكثر وخصوصاً العناصر الأنتقالية مثل الحديد والنيكل ...الخ فهي تحتاج الى نموذج اكثر تعقيداً وذلك لأن الألكترونات التكافئية تكون في المدار 3d وهذه الالكترونات تكون موضعية (localised) ولذلك فهي تحاول تكوين اواصر تساهمية مع جاراتها في الذرات الأخرى بينما نرى أن الكترونات المدار 4s التكافئية تكون التآصر المعدني وبذلك تكون أواصر هجينة في هذه العناصر .

6 - 2 التأصر الثانوي

اضافة الى الأواصر الثلاث الأساسية المذكورة اعلاه (الأيونية والتساهمية والمعدنية) هناك أواصر أخرى تلعب دوراً مهماً في تفسير بعض الخواص الثانوية للترابط ومن هذه الأواصر أصرة فاندر فالز (Vander walls bond). ان طاقة الترابط الناتجة من هذه الأصرة ضعيفة نسبياً مقارنة بما عليه في الأواصر الصلبة الأيونية والتساهمية . توجد أصرة فاندر فالز في جميع التجمعات الذرية والجزيئية . لكن أهميتها تزداد في المواد الصلبة الجزيئية حيث تهيء الميكانيكية الرئيسية للتجاذب بين الجزيئات . لفهم هذه النوع من التآصر سنأخذ بلورة الأركون كمثال . ولندرس عملية التفاعل بين ذرتي أركون حيث لكل منهما مدار خارجي مشبع بالألكترونات ويكون للتوزيع الألكتروني حول النواة تماثل كروي ويبقى لفترة كبيرة مقارنة مع فترة تغير الكثافة الألكترونية ، على أي حال في أية لحظة من الوقت توجد درجة من انعدام التماثل في الكثافة الألكترونية وتسلك الذرة على شكل مزدوج قطبي ذي عزم P_1 الشكل (7 - 2) وعلى مسافة r من المزدوج القطبي تتعرض ذرة أركون أخرى للمجال والذي يتضح بالعلاقة التالية

$$E = \frac{P_1}{4\pi\varepsilon_0 r^3} \qquad \dots (2-17)$$

تستقطب الذرة الثانية في هذا المجال وتكتسب عزم الثنائي القطبي الذي يتضح بالعلاقة

$$P_2 = \alpha E \qquad \dots (2-18)$$

أما طاقة عزم ثنائي القطب P_2 فتأخذ الشكل التالي

$$U = \alpha E^2 \qquad \dots (2-19)$$

$$U_{(r)} = -\frac{\alpha P_1^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 r^6} \qquad \dots (2-20)$$

ان الشكل (7 - 2) يوضح التسلسل فيه عمليات التفاعل وتبين المعادلة 2.20 أن $U_{(r)}$ تجاذبية وتعتمد على $\frac{1}{r^6}$

استنتج العالم لندن (London) عام (1930) أن هناك علاقة اكثر تفصيلاً ويتبين أن ثنائي القطب الثاني عندما يتفاعل مع الأول ، لجسيمين ، ليس من

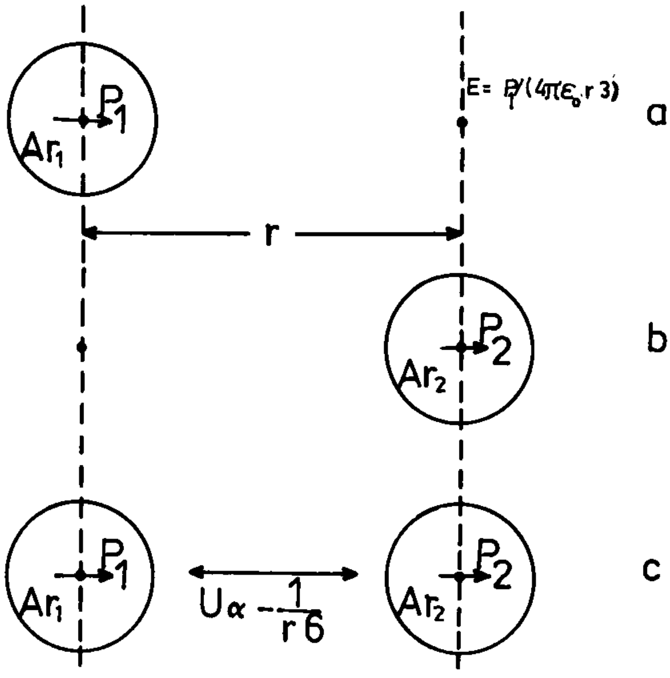
الضروري أن يكونا من النوع نفسه بل قد يكون من ذوات استقطابية α_2 , α_1 لذا فأن طاقة التجاذب تتضح بالعلاقة الأتية :

$$U_L = -0.75 \frac{h\bar{\nu}_0 \alpha_1 \alpha_2}{16\pi^2 \varepsilon_0^2 r_{12}^6} \qquad \dots (2-21)$$

اذ ان ν_0 نردد المميز لتغير الكثافة الألكترونية و r_{12} هي المسافة بين الجسيمين المتفاعلتين وhثابت بلانك.ويكون التأثير الناتج ذا طبيعة تجاذبية مهما يكون اتجاه التغير الأني للكثافة الألكترونية حول الذرة المعينة .

أن المعادلة (21 - 2) صحيحة أ:'كانت المسافة بين الجسيمين لا تتجاوز3×10^8 متر المسافات الأكبر من 3×10^{-7} متر فأن المجال المتولد عن أحد الذرات يحتاج الى زمن يساوي 10^{-15} ثانية تقريباً للوصول الى الجسم المجاور. وهذا الوقت مقارب لفترة تغير الكثافة الالكترونية ونتيجة لذلك يحدث التداخل . وتبين من المعالجات النظرية ان طاقـــة التداخل تختـــزل وتصبح متناسبـــة مـــع $\frac{1}{r^7}$ بدلا من $\frac{1}{r^6}$ وتوجد آصرة اخرى . تلعب دوراً مهمة في بعض المواد البلورية الآصرة الهايدروجينية (Hydrogen bond)مثل بلورة الثلج ولنأخذ أولاً عملية التآصر في جزيئة الماء المنفردة ، هناك أصرة تساهمية بين ذرة الأوكسجين وكل من ذرتي الهيدروجين وكما هي موضحة في الشكل (8a - 2) وهذه الأصرة تكون قوية الاّ اننا عندما نأخذ بنظر الأعتبار الترابط بين جزيئات الثلج البلوري نجد ان قوة الربط ضعيفة جداً (0.1eV) حيث أن درجة أنصهار الثلج هي صفر فقط . وتفسير ذلك هو بالرغم من أن كل جزيئة ماء هي لكل معادلة كهربائياً ، فأن توزيع الشحنة الداخلية يولد تفاعلا بين الجزيئات . وهكذا عند وصف الأشتراك الألكتروني في الأصرة H – O يجب أن تشار الى الألكترونات المساهمة للآصرة التساهمية تنجذب بقوة اكبر نحو ذرة الأوكسجين فتتكون شحنة سالبة على ذرة الأوكسجين وشحنة مناظرة على ذرة الهايدروجين كما هو موضح في (8b - 2) وهكذا يتكون ثنائي القطب الكهربائي (electric dipole) في جزيئة الماء كما يشار بالمتجه في الشكل (2.8) ونتيجة لوجود قطبية كهربائية فأن هذه الثنائيات تجذب بعضها الآخر مكونة بلورة الثلج .

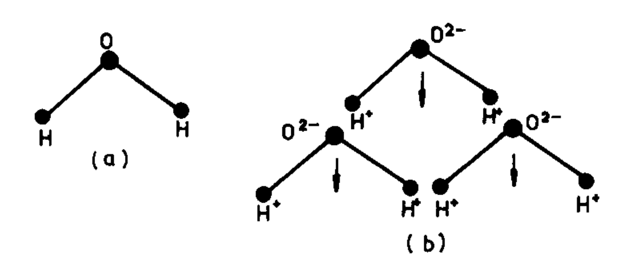
ان الأصرة الموصوفة هنا تعرف بالآصرة الهايدروجينية وتعرف احيانا بجسر الهايدروجين . ويرجع السبب للدور الكبير الذي تلعبه نواة الهايدروجين الصغيرة والتي هي البروتون .



الشكل (2 - 7)تجاذب فاندرفالز (a) مزدوج قطبي (P_1) اني في ذرة Ar_1 الذي يعطي المجال $E = P_1 / 4\pi\varepsilon_0 r^3$ عند مسافة r عنه

(b) ذرة الاركون الثانية عند هذه النقطة تستقطب في هذا المجال لتعطي مزدوجا قطبيا P_2 يكافيء P_1

(c) تتناسب الطاقة الكامنة بين الذرات مع $\frac{1}{r^6}$



الشكل (2 - 8) (a) جزيئة ماء

(b) تنظيم جزيئات الماء بسبب الاصرة الهايدروجينية . اتجاه الاسهم يمثل اتجاه عزم ثنائي القطب

الأسئلة

2 - 1 ان طاقة التماسك بين أيوني الكلور والصوديوم في بلورة كلوريد الصوديوم تساوي 6 الكترون فولت وطاقة التأين لذرة الصوديوم هي 5 الكترون فولت ، اما الألفة الألكترونية (Electron affinity) للكلور هي 3.75 الكترون فولت . جد المسافة البينية للأيونات (ملاحظة أهمل طاقة التنافر) .

2 - 2 الطاقة الكامنة لزوج من ذرات البلورة تتضح بالعلاقة $U = \frac{A}{r^9} - \frac{B}{r}$ حيث تمثل r المسافة البينية فاذا علمت أن طاقة التفكيك لهذه الجزيئة هي 8×10^{-19} جول ومسافة التوازن (r_0) تساوي 0.28 نانومتر : (a) احسب قيمة الثوابت B , A (b) احسب القوة اللازمة لكي تقلل المسافة البينية بمقدار 5٪ .

2 - 3 طاقة الربط (U)لزوج من الأيونات في بلورة فلوريد الليثيوم (LiF) يمكن ان تكتب بالعلاقة التالية

$$U = \alpha \exp(r/b) - Aq^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$$

حيث A ثابت ما ديلونك و q الشحنة الكهربائية للأيونات و r المسافة البينية للأيونات المجاورة وكل من b , α ثوابت . أوجد الطاقة الكلية (U) لـ LiF) حيث $b = 0.02 , A = 1.75$ نانومتر وثابت الشبيكة لبلورة فلوريد الليثيوم هو 0.4 نانومتر) .

2 - 4 وضح نوع التاصر في بلورة الجرمانيوم (Ge) النقي . ما هي المميزات الفيزيائية لهذا النوع من الترابط

2 - 5 ماتاثيركل من قوة فاندرفالز والحركة الأهتزازية عند درجة صفر المطلق للأيونات والذرات على طاقة الترابط في البلورات الأيونية ؟

2 - 6 تودي قوة فاندر فالز بين ذرتي الهليوم الى طاقة ترابط حوالي 6×10^{-5} الكترون فولت ، اما مسافة التوازن فتساوي 3 انكستروم تقريباً . اعستخدم مبدأ عدم التحديد لأثبات أنه لا يمكن تكون هليوم الصلب تحت ضغوط الأعتيادية (أي اقل من 25 ضغط جوي)

الفصل الثالث

الحيود في البلورات

(Crystal diffraction)

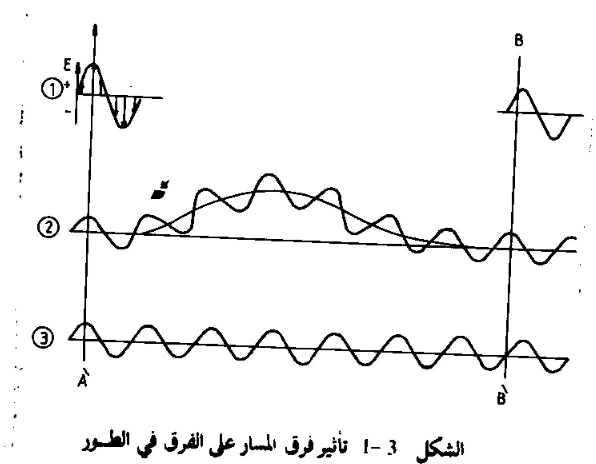
1 - 3 المقدمة

في هذا الفصل سنتناول كيفية ايجاد التركيب البلوري للمواد الصلبة بأستعمال مفاهيم الحيود في البلورات . من الممكن فهم التركيب البلوري للمواد الصلبة بدراسة نمط الحيود لحزمة من الأشعة الساقطة على البلورة . ومن الممكن قياس اعتجاه الحزمة الحايدة وشدتها والحصول على معلومات التركيب البلوري المسؤول من هذا الحيود .

يستخدم عادة لدراسة التركيب البلوري ثلاثة أنواع من الأشعة السينية (x - ray) والحزمة النيوترونية (Neutron beam) والحزمة الألكترونية (Electron beam) وبما أن عملية التفاعل وقوانين الحيود للحزم الثلاثة متشابهة لذلك يكفي شرح المفصل لحيود الأشعة السينية ابتداءا بقانون براك (Bragg's Law) ثم اعستخدام المعادلات المعقدة في نظريات الأستطارة (Scattering) ومبدأ الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice) . وفي نهاية الفصل نشرح بأيجاز حيود الحزم الألكترونية والنيوترونية

2 - 3 حيود الاشعة السينية

يخيل للقاريء ان الحديث عن الحيود يعنـــي التداخل (Interference) فمن الصعب في هذه الحالة التميزبين الأثنين ولذلك يمكن القول أن الحيود يحدث عندما يكون هناك فرق طور (Phase difference) بين موجتين أو اكثر وينتشران في نفس الأتجاه تقريبـــاً . ولايضاح الفرق بين طوري الموجتين نفترض أن حزمة الأشعة السينية رقم (1) في الشكل (3.1) تنتشر من اليسار الى اليمين ولتبسيط الأمر سوف نعتبر هذه الحزمة أو الموجة مستوية ومستقطبة لنفرض أن هذه الحزمة تتكون من الموجتين رقم (2) ورقم (3) في الشكل (1 - 3) وسعة كل موجة من هاتين الموجتين هي نصف سعة الموجة الأصلية والتي أعطيت لها رقم (1) ولهما نفس الطور على جبهة الموجة AA' (wave front) وبعبارة أخرى أن متجهه مجاليهما الكهربائيين متساويان في القيمة والأتجاه في أي لحظة عند نقطة معينة باتجاه انتشار والموجة (جبهة الموجة تكون السطح العمودي على اتجاه انتشار الموجة)



الشكل 3 - 1 تأثير فرق المسار على الفرق في الطـور

لنفرض الان تجربة خيالية والتي تكون فيها الموجَة رقم(3)منتشرة على خط مستقيم بينما ، الموجة؟ تسير على منحني قبل ان تلتقي بالموجة (2) لنرى ماذا يحدث على جبهة الموجة BB' بعد ان استأنفت الموجتان مسيرهما في الاتجاه الاصلي . المتجه الكهربائية تكون للموجة (2)عند قمتها العظمى على هذه الجبهة ، بينما المتجه الكهربائي لموجة (3) تصل الى الصفر في نفس النقطة . وعليه فان هناك هناك فرقا في الطور بين الموجتين (2) و(3). اذا اضفنا هاتين الموجتين لبعضهما نجد ان الموجة(1)ستكون لها السعة المبدئية في الجهة اليمنى في اعلى الشكل (1-3).لو افترضنا ان سعة الموجة (2)و(3)هي وحدة

واحدة عند ذلك تكون قيمة سعة الموجة(1)في الجهة اليسرى هي وحدتين ، بينما تكون قيمة سعة الموجة(1)في الجهة اليمنى تساوي 1.4 فاذا افترضنا ان متجة $\bar{E}$ تتغير جيبياً مع المسافة . لذلك من المناقشة اعلاه يمكن ان نستنتج ما يلي :

1- الفرق في طول المسارات المقطوعة يؤدي الى فرق في الطور.

٢- الفرق في الاطوار يؤدي الى تغيير في سعة الموجة .

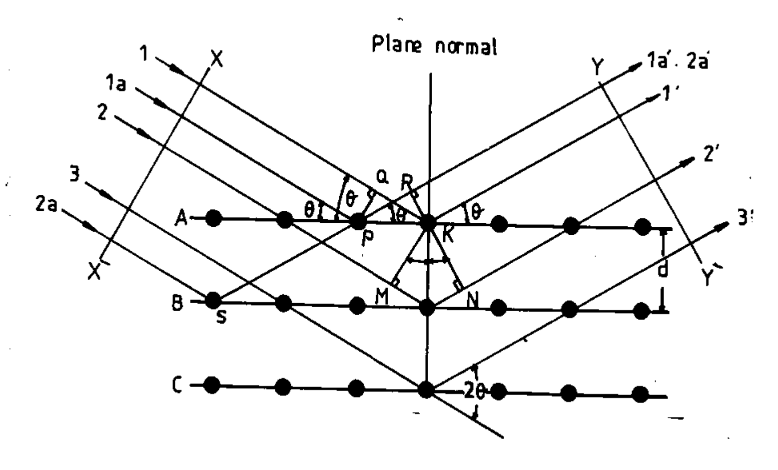
كلما كان الفرق كبيراً في طول المسارات المقطوعة فأن فرق الطور يكون كبيراً أيضاً حيث أن طول المسار يقاس عادة بوحدات طول الموجة ، كذلك فأن فرق الطور يقاس بوحدات طول الموجة نفسها . فلوكان طول مسار الموجة (2) المبين في الشكل (3.1) اطول مما يظهر عليه بربع طول الموجة فأن فرق الطور يساوي نصف الموجة لذا تكون الموجتان (3,2) في طورين مختلفين على جبهة الموجة BB' الذي يلغي احدهما الأخر ، لان متجهه المجال الكهربائي لكل موجة أما صفراً أو في اتجاهين متضادين (أي يختلفان في الطور بمقدار 180°) . اما اذا كان طول مسار الموجة (2) مختلفاً بثلاثة أرباع طول الموجة على ما هو مبين فستظهر الموجتان (3,2) وكأن لهما الطور نفسه وبذلك يصبح متجه سعة الموجة (1) في الجهة اليمين مساوياً الى متجهه سعة الموجة الأصلية . نستنتج مما سبق حقيقة هامة وهي ان الموجتين تمتلكان الطور نفسه اذا كان فرق الجهد بينهما صفراً او اي عدد كامل من طول الموجة ($n\lambda$) حيث

$$n = 1, 2, 3, \ldots$$

و λ تمثل طول الموجة .

الفروق في مسارات حزم الأشعة الساقطة تظهر بصورة طبيعية عندما تحاد هذه الحزم بواسطة البلورة . ان الشكل (2 ـ 3)يبين مقطعاً من البلورة مكونة من مستويات متوازية مثل C, B, A وهذه المستويات تكون على بعد (d) من بعضها وهي المسافة العمودية بين المستويات وتسمى بالمسافة البينية . لنفترض ان حزمة السينية (احادية التردد وذات طول موجي λ) أسقطت على بلورة بزاوية مقدارها θ كما هو واضح في الشكل (3.2) حيث تمثل الزاوية المحصورة بين الحزمة الساقطة واحد المستويات الذرية . ولنرى الان فيما اذا كانت الحزمة الساقطة على البلورة ستحاد وتحت اي شروط ..

يمكن تعريف الحزمة المحادة (Diffracted beam) بأنها تتكون من عدد كبير من الموجات المستطارة والتي لها خاصية تقوية بعضها البعض . لذلك يعتبر الحيود ظاهرة استطارة حيث تستطير الاشعة الساقطة من الذرات وفي كل الاتجاهات . في اتجاه معين تكون جميع الموجات المستطرة في طور واحد ، لذلك تقوي هذه الموجات بعضها لبعض ، حيث تنتج الحزمة المحادة .



شكل 2 - 3 الية انعكاس الاشعة السينية بواسطة الشبيكة البلورية .

عند توفر الشروط اللازمة في الشكل (2 - 3) فأن الحزمة المحادة تنعكس فقط بزاوية مقدارها (θ) والتي تساوي زاوية السقوط . يمكننا برهنة ذلك بسهولة لمستوى واحد اولاً ثم لجميع المستويات الذرية التي تكون البلورة .لناخذ الشعاعين (1) و(1a) في الحزمة الساقطة على البلورة حيث أن هذين الشعاعين .يصطدمان بالذرتين K وP في المستوى الاول للذرات . ان هذين الشعاعين يسيطران في جميع الاتجاهات ونستطيع بذلك ان نرى ان الاستطارة في الاتجاهين 1 1'a متساوية لبعضها وفي الطور نفسه ، ويحدث ذلك لان فرق المسار لهاتين الاشعتين بين جبهتين الموجة YY' , XX' هو

$$QK - PR = PQ\cos\theta - PQ\cos\theta = 0 \qquad \ldots(3-1)$$

وبالطريقة نفسها فان بقية الاشعاعــات المسيتطرة من الذرات كافة في المستوى الاول وفي اتجاه مواز لاتجاه 1' تكون في طور واحد. لذلك تضاف الاشعة المستطارة من الذرات الى الحزمة المحادة . وهذا يكون صحيحاً لجميع المستويات الاخرى . يبقــى ان نرى ماهو الشرط الذي بموجبة تكون الاشعاعات المستيطرة من الذرات في مستويات مختلفة

مقوية بعضها البعض الاخر أن الشعاعين (1) , (2) قد استطارا وعلى سبيل المثال من من الذرتين L , K على التوالي ، وعلية فان فرق المسار للشعاعين 1'K1 , 2L2' هـو .

$$ML + LN = d'\sin\theta + d'\sin\theta \qquad \ldots (3-2)$$

وهذا الفرق في المسار هو أيضاً نفسة للاشعة المستطيرة من نقطتي الشبيكة L, S أو وهكذا فأن الشعاعين المستطيرين 2',1' سوف يكونان في الطور نفسة بشكل عام على شرط أن يكون فرق المسار بينهما مساوياً لطول موجة واحدة أو عدد كامل ($n\lambda$) من اطول موجة وبعبارة أخرى عندما يكون .

$$n\lambda \quad 2d\sin\theta \qquad \ldots (3-3)$$

حيث n تمثل مراتب الحيود وتاخذ القيمة 1 ,2 ,3 ,... الخ .

لقد تم اشتقاق المعادلة 3 – 3 من قبل العالم براك (Bragg) وسميت باسمه . وتعتبر هذه المعادلة شرطاً من شروط حدوث الحيود . وهذا يعني انه لطول موجي معين ولقيمة معينة من (d) هناك قيم متعددة لزوايا السقوط θ_1 , θ_2 , θ_3 تحقق شرط الحيود وكل قيمة من هذه الزوايا تقابل قيمة معينة لـ n.

نلاحظ من الشكل (2 – 3) انه عندما يكون الانعكاس في المرتبة الاولى ($n = 1$) فان الفرق بين طول المسار للشعاعين 1' , 2' يكون مساويا لطول موجة واحدة ، اما فرق المسار للشعاعين 1' , 3' فيكون مساويا لطول موجتين وللشعاعين 1 ,4 مساويا لثلاثة اطوال موجية وهكذا .

هناك شرط مهم لحدوث ظاهرة الحيود هو انه يجب ان تكون المسافات البينية مساوية تقريبا لطول الموجة المستخدمة . ولحسن الحظ ان المسافات البينية للمستويات الذرية في البناء البلوري لمعظم المعادن تساوي طول الموجة للأشعة السينية من حيث المقدار

وهذا الشرط واضح في قانون براك ، حيث ان قيمة ($\sin\theta$) لا يمكن ان تزيد على الواحد في اي حال من الاحوال ، اي ان

$$\frac{n\lambda}{2d} = \sin\theta \leq 1$$

لذا $n\lambda$ يجب ان تكون اقل من 2d او

$$\lambda < 2d \qquad \ldots (3-4)$$

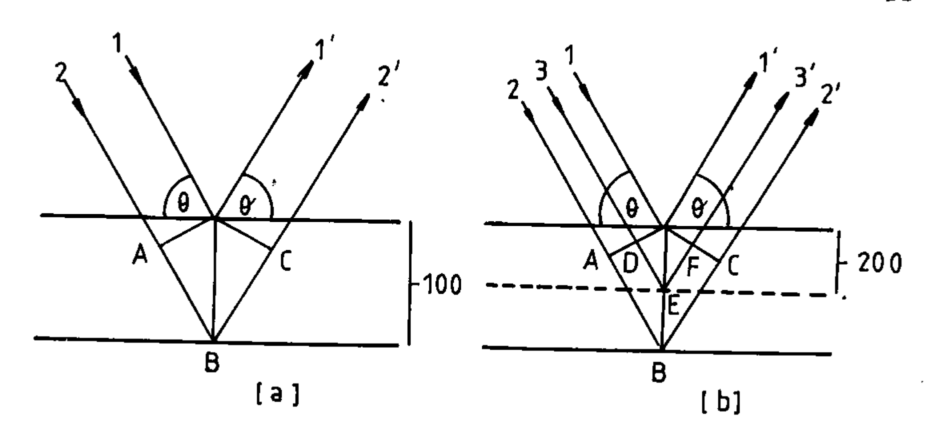
ان قيمة(d)في كثير من المستويات الذرية هي في حدود 3 انكستروم او اقل وعليه فان قيمة λ يجب ان تكون بحدود 6 انكستروم تقريباً على هذا فليس بالامكان دراسة الحيود في البلورات باستخدام الاشعة فوق البنفسجية ($\lambda = 500A°$) من الممكن كتابة قانون براك بالصيغة التالية

$$\lambda = \frac{2d}{n} \sin\theta$$

ان معامل λ في هذه المعادلة يساوي واحدا ، فبأمكاننا اعتبار الانعكاس باي مرتبة مكافئاً للانعكاس من المرتبة الاولى من المستويات التي تكون المسافة بينها مساوية الى $\frac{1}{n}$ من المسافة البينية . وعليه يمكن اعادة كتابة معادلة براك بالشكل التالي

$$2d_{hkl} \sin\theta = \lambda \qquad \dots (3.5)$$

حيث $d_{hkl} = \frac{d}{n}$ لتوضيح استخدام هذه المعادلة لاحظ الشكل(3.3)



الشكل (3 - 3)(a) تكافؤالانعكاس (100) من المرتبة الثانية (b) وانعكاس (200) من المرتبة الاولى

لنفرض ان الحيود من مستوى(100)من المرتبة الثانية (n=2)، لذا فان فرق المسار ABC بين شعاعين محادين من المستويات (100)المتعاقبة يكون 2λ . اذا فرضنا ان المستوى 200)يقع في منتصف المستويات(100) حيث يكون مجموعة مستويات (200) بذلك يكون فرق المسار DEF للشعاع المحاد من هذه المستويات يساوي طول موجي واحد (λ) ويدعى بالانعكاس (200)من المرتبة الاولى. وبالطريقة نفسها فان الانعكاسات(300) و (400)الخ تناظر الانعكاسات من المرتبة الثالثة والرابعة ---الخ للمسنويات (100)

وبصورة عامة فان الانعكاس من الرتبة n لمجموعة مستويات ذات المسافات البينية d يعتبر بالانعكاس من المرتبة الاولى لمستويات(nh nk nl)ذات المسافات $d_{nkl} = \dfrac{d}{n}$

وهذا يتفق مع تعريف معاملات ملر ، لان(nh nk nl)معاملات ملر لمستويات متوازية للمستوى (hk$l$)ولكن بمسافات $\frac{1}{n}$ من المسافة البينية .

3 - 3اتجاهات الحيود

كيف تتعين الزاويا التي تحادبها حزمة من الاشعة السينية الاحادية الموجة والساقطة على بلورة ما لقد تبين من الشكل (3.3) انه من الممكن الحصول على زوايا الحيود 2θ في المستويات (100) وذلك بأستخدام الحزمة الساقطة في زوايا السقوط الملائمة . وبذلك يمكن الحصول على حدود المرتبة الاولى والمرتبة الثانية والمرتبة الثالثة كما على الحصول على الحيود من مجموعة المستويات (110)، ومجموعة (111) في نظام المكعب مثلاً . لذا يصبح من الضروري إيجاد علاقة عامة للتنبأ بزاوية الحيود لاي مجموعة من المستويات في الانظمة البلورية .

لقد وجدنا في البند(5 -1)أن العلاقة بين ضلع المكعب (ثابت الشبيكة) والمسافة البينة للمستويات بدلالة معاملات ملر تأخذ الصيغة التالية .

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \qquad \dots (3-6)$$

وبالتعويـض عـن قيمة d_{hkl} من المعادلة (5 - 3)

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) \qquad \dots (3-7)$$

لنفترض اننا استخدمنا طول موجة محددة (λ) وبلورة معينة (مكعب) بطول ضلع وحدة الخلية (a) عند ذلك تصبح المعادلة (7 - 3) جيدة للتنبؤ عن جميع زوايا الحيود المحتملة والتي بها يحدث الحيود من المستويات (hkl) . يمكن كتابة المعادلة (7 - 3) لمجموعة المستويات (110) بالشكل التالي :

$$\sin^2\theta_{110} = \frac{\lambda^2}{2a^2} \qquad \dots (3-8)$$

اما اذا افترضاً أن البلورة تكون من النظام الرباعي وذات الاضلاع c,a عند ذلك يمكن الحصول على العلاقة التالية :

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4} \left(\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right) \qquad \dots (3-9)$$

وبالطريقة نفسها يمكن الحصول على علاقة عامة لاي نظام بلوري أخر . ومن الامثلة أعلاه تبين أنه بالامكان تعين اتجاهات الحيود لطول موجي معين بواسطة حجم وشكل وحدة الخلية في البلورة .

وهذه نقطة مهمة جدا من الناحية العملية ، اي انه اذا تم تعيين اتجاهات الحيود عمليا يمكننا تعيين حجم وشكل وحدة الخلية وهذه من اهم القياسات في تجارب الحيود بصورة عامة . ولا بد لنا ان نذكرهنا انه بالامكان تعيين مواقع الذرات في وحدة الخلية من خلال قيم شدة الحزمة المحادة . والتي سياتي ذكرها في البنود القادمة .

4 - 3 الطرق التجريبية لدراسة الحيود

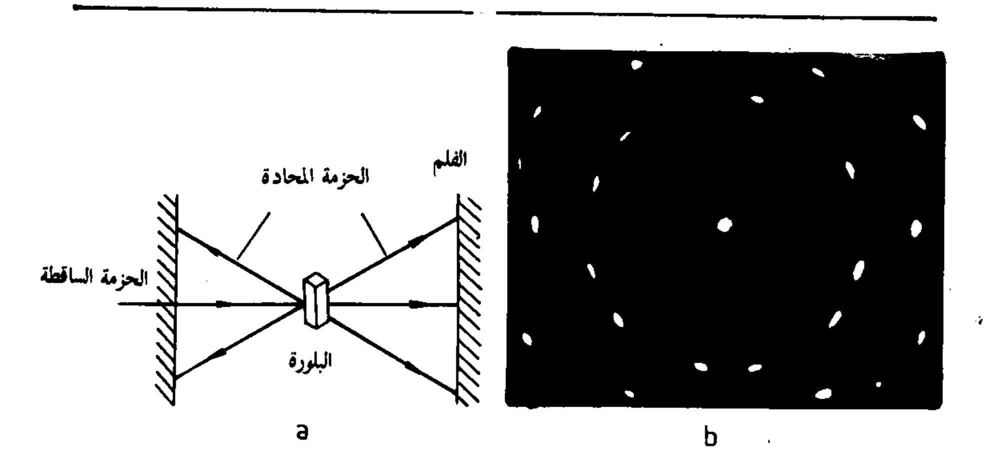
يحدث الحيود عندما يتحقق قانون براك ولكن هذا القانون يضع قيودا على كيفية حصول الحيود من بلورة ما باستعمال حزمة ذات طول موجي (λ) وزاوية سقوط (θ) لذا يمكن القول ان وضع البلورة في مسار الاشعة السينية بشكل عشوائي لا يؤدي الى حدوث حيود او في الحقيقة عدم الحصول على نمط الحيود . لذا يجب تصميم بعض الطرق التجريبية التي يمكن بواسطتها الحصول على نمط الحيود بسهولة ، بصورة عامة ويجب ان تكون هذه الطرق مبنية على اساس اما تغير (λ) بشكل مستمر اثناء التجربة او تغير(θ) باستمرار خلال تسجيل نمط الحيود . ويمكننا ذكر ثلاثة طرق رئيسية مبنية على اساس تغير θ, λ .

الطرق المستخدمة	طول الموجة λ	زاوية السقوط θ
١ - طريقة لاوي Laue method	متغير	ثابتة
٢ - طريقة تدوير البلورة Rotating crystal method	ثابت	متغيرة جزئياً
٣ - طريقة المسحوق Powder method	ثابت	متغيرة

1 - طريقة لاوي

تستخدم هذه الطريقة للتحديد السريع للتناظر واتجاه المستويات في البلورات الاحادية (Single crystal) . الشكل(3.4a)يوضح الترتيب العملي لطريقة لاوي (Laue method)حيث تسلط حزمة من الاشعة السينية البيضاء (يكون طيفها ذا طول موجي مستمر) على البلورة وباتجاه ثابت ويوضع غشاء فوتوغرافي مسطح في طريقة الاشعة امام وخلف البلورة . وبما ان طول الموجة λ تتغير باستمرار فان البلورة ستختار الطول الموجي الذي يحقق قانون براك في ذلك الاتجاه وعليه فان الحزمة الحايدة سوف تخرج

بزاوية معينة . ان موقع الحزم الحايدة سوف تظهر على الغشاء كبقع (spots) كما هي موضحة في الشكل(3.4b) وبما ان طول الموجي الحايد لهذه البقع غير مقاس لذا فليس بالامكان تحديد المسافات البينية للمستويات في البلورة ولكن يمكن تحديد النسب بينهم وبذلك يمكن تحديد شكل وحدة الخلية ولكن ليس الحجم المطلق لها لقد لوحظ انه اذا كان اتجاه الحزمة الساقطة هومحور التناظر (axis of symmetry) للبلورة ، فان نمط الحيود الناتج يبين نوع التناظر. الشكل 3.4b يوضح التناظر السداسي للبلورة Mg .

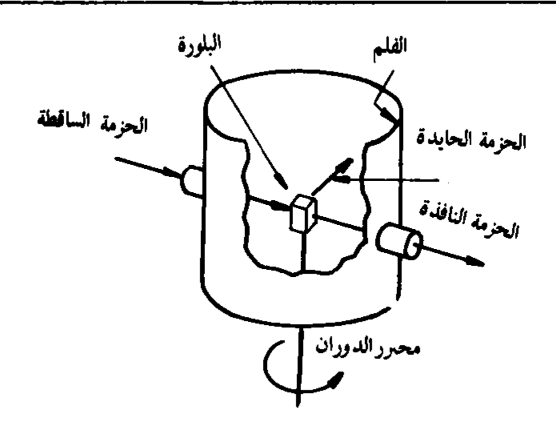


الشكل (4 - 3) (a) توضيح اجراء الترتيب العملي للتجربة
(b) نمط لاوي للحيود لبلورة Mg

2- طريقة تدوير البلورة

هذه الطريقة تستعمل في دراسة تركيب البلورة الاحادية ايضا . ان الشكل (3.5) يوضح الترتيب العملي لهذه الطريقة . توضع البلورة المطلوب دراستها عادة على محور قابل للدوران ويكون حجمها حوالي واحد ملم[٣] . ويلصق الفلم عادة علي السطح الداخلي للاسطوانة المتحدة المركز مع محور الدوران. توجه حزمة احادية التردد (Monochromatic) في خطوط متوازية وتسقط على البلورة التي يمكنها الدوران اذا تطلب ذلك حتى يتم الحصول على شرط الحيود وبذلك فان λ و θ تحققان قانون براك . وعند تحقيق

قانون براك فان الحزمة الحايدة تنفذ من البلورة وهكذا تظهر البقع على الفلم لتسجيل انماط الحيود (كل من الزوايا والشدة) للاتجاهات المختلفة ويمكن عندها تحديد شكل وحجم وحدة الخلية وترتيب الذرات في داخل الخلية.



الشكل (5 - 3) الترتيب العملي لطريقة تدويرة البلورة

3- طريقــة المسحوق-

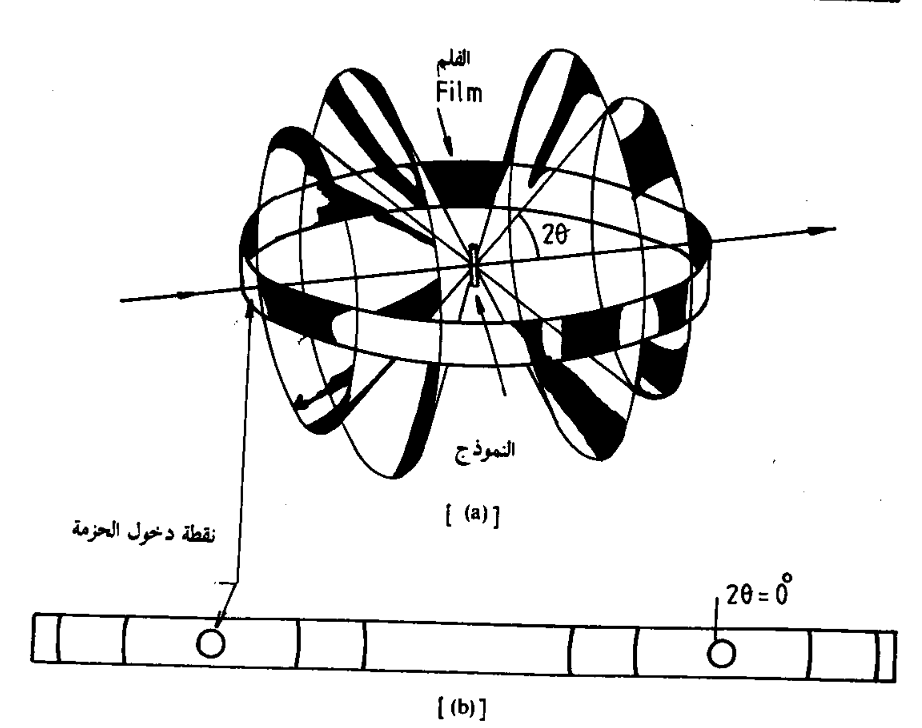
في هذه الطريقة ، تسحق البلورة بشكل جيد الى ان تصبح على شكل حبيبات دقيقة جداً . يوضع جزء من هذا المسحوق في مسار الاشعة السينية ذات تردد احادي . وكل جسيم من جسيمات المسحوق هي عبارة عن بلورة صغيرة جداً ذات اتجاه عشوائي بالنسبة للاشعة الساقطة . وبما ان هناك عددا كبيراً من هذه الجسيمات في مسار الاشعة الساقطة ، فيكون هناك احتمال كبير من توافق وضع احدى الجسيمات اوعدد منها مع زاوية سقوط الاشعة بحيث يتحقق قانون براك وبذلك تحدث ظاهرة الحيود .

على سبيل المثال اذا كان وضع المستويات (100) في عدد من هذه الجسيمات البلورية يسمح لتحقيق معادلة براك فعند ذلك تحدث ظاهرة الحيود . وقدتكون هناك مجموعة اخرى من المستويات (100) بوضع يسمح بتحقيق قانون براك ايضاً فيحدث الحيود وهكذا بالنسبة الى مجاميع اخرى . بعبارة اخرى سوف نحصل على نمط حيود من مجاميع في اوضاع مختلفة تسمح بتحقيق قانون براك . ويمكننا القول ان نمط الحيود

الذي يتم الحصول عليه بهذه الطريقة يكون مطابقاً للحيود الذي نحصل عليه من البلورة الدوارة حول جميع المحاور الممكنة وليس حول محور واحد .

بما ان النموذج الذي تحت الاختبار عادة يحتوي على ملايين من الحبيبات الصغيرة وباتجاهات عشوائية فسوف يوفر مجاميع من مستويات الانعكاس لتحقيق قانون براك . وتحدث عملية الانعكاس من هذه المجاميع من المستويات باتجاهات مختلفة بالنسبة الى اتجاه الشعاع الساقط . اضافة الى ذلك فان كل مجموعة من المستويات تحقق الانعكاس بمراتب مختلفة مسموحة . وبما ان اتجاه الانعكاسات متساوٍ في جميع الاتجاهات تقريباً لذا فان الحزمة المحادة تكوّن مخروطاً محوره باتجاه الشعاع الساقط .

ان الشكل (3.6a) يبين اربعة مخاريط من الشعاع المحاد ، والشكل (3.6b) يبين نمط الحيود على غشاء تصويري مسطح . ان خط الحيود ذا الزاوية الصغيرة (2θ) يعود الى مستويات متوازية ذات اكبر مسافة بينية d_{hkl} على سبيل المثال ، وتكون لها



الشكل (3 - 6) a - اربعة مخاريط من الشعاع المحاد b - نمط الحيود على فلم تصويري

اكبر قيمة عندما تكون قيمة ($h^2 + k^2 + l^2$) اصغر مايمكن . بالطبع ان القيمة الدنيا لمجموع مربعات معاملات ملر تساوي واحداً ، وعند ذلك يكون (hk$l$) هو (100) ولهذا نقول ان بقعة الحيود او خطوط الحيود تقابل اصغر زاوية اي اقرب مايمكن من نقطة المركز . والخط التالي يكون (110) مثلاً ، اي ان قيمة ($h^2 + k^2 + l^2$) تساوي 2 وهكذا تستعمل طريقة المسحوق هذه بشكل واسع في حقل فحص المعادن ويستخدم ايضاً عند عدم امكانية الحصول على بلورة احادية كبيرة نسبياً(الحجم 1 ملم³)من بعض المواد.

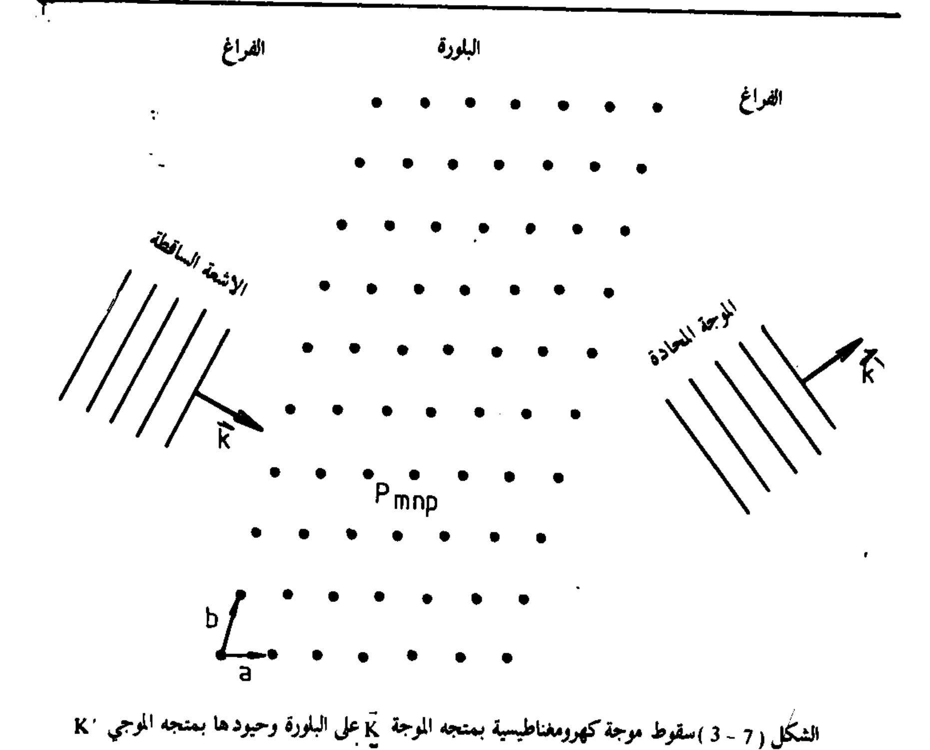
ان هذه الطريقة مفيدة جداً في حالات تعين ثوابت البلورة ، أوفي دراسة تغيير الطور (Phase change) للمواد .

5 - 3 اشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة

عند اشتقاقنا لقانون براك للحيود حصلنا على توضيحات لشروط التداخل للموجات المستطيرة في الذرات اوالايونات الواقعة على نقاط الشبيكة . ومنها امكن حساب المسافة البينية بين المستويات الذرية

في هذا البند يوجه الاهتمام بدراسة شدة الحزمة المستطيرة الناتجة بسبب توزيع الالكترونات في وحدة البناء للبلورة ، ولذلك علينا ان نقوم بتحليل اعمق من قانون براك . وان ابسط طريقة لهذا التحليل ان نجمع الموجات المستطيرة لكل مراكز الاستطارة من البلورة .

ان اول من درس هذه الظاهرة هو العالم لاوي حيث حاول ان يجد اتجاهات الموجات المستطيرة الخارجة من البلورة بالنسبة للموجة الساقطة لاحظ الشكل (7 - 3). لنفترض ان التفاعل بين الاشعة الساقطة والبلورة هومن النوع الخطي (linear interaction) اي ان التردد الزاوي (ω') للموجة الحايدة يساوي التردد الزاوي (ω) للموجة الساقطة . والعلاقة بين التردد الزاوي والعدد الموجي (wave number) الموجة مافي الفراغ تعطى بـ $\omega = cK$ حيث c يمثل سرعة الضوء . لذا عندما يكون $\omega = \omega'$ فان $K = K'$



الشكل (7 - 3) سقوط موجة كهرومغناطيسية بمتجه الموجة $\vec{K}$ على البلورة وحيودها بمتجه الموجي K'

والآن نحاول ان نجد اتجاه الموجة الحايدة $\vec{K}'$ بدلالة الموجة الساقطة $\vec{K}$ والمتجهات الاساسية $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ للشبيكة البلورية نلاحظ من الشكل (7 - 3) ان المتجه ρ_{mnp} يساوي

حيث (mnp اعداد صحيحة) $\vec{\rho}_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$

وينطلق هذا المتجه من نقطة الاصل (0) ويمر عبر نقاط الشبيكة داخل البلورة . فاذا اعتبرنا ان عامل الطور (phase factor) للموجة الساقطة عند نقطة الاصل يساوي واحداً فسيكون عامل الطور عند النقطة المعرفة بالمتجه ρ_{nmp} هو $e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}_{mnp}}$.
ويمكن التعبير عن احدى مركبات المجال الكهربائي للموجة الساقطة على البلورة رياضياً بالعلاقة التالية

$$E(x) = \vec{E}\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)} \qquad \dots (3-2)$$

المعادلة 2 - 3 يحتوي على جزء حقيقي (real) وجزء خيالي (imaginary) . في الحقيقة ان الجزء الحقيقي هو المهم في الفيزياء . لذا سنأخذ هذا الجزء في نهاية

الحسابات . على اي حال عند سقوط هذه الموجة على مركز الاستطارة المعرف بالمتجــه ρ_{mnp} فان هذا المركز يولد موجات مستطيرة يعبر عنها رياضياً بالعـــلاقة التاليـــة :

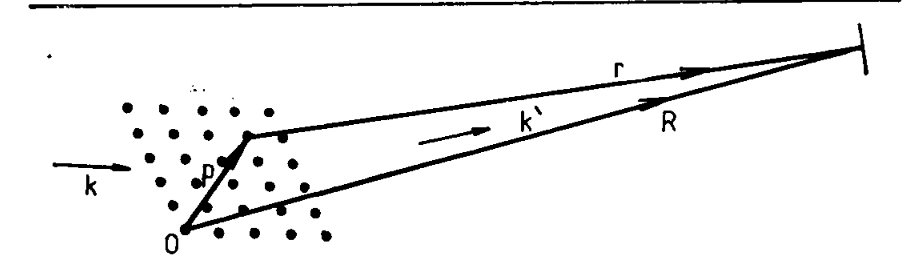
$$\vec{E} = C\, E_{(\vec{\rho})} \frac{e^{ikr}}{r} = CE_0\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} \frac{e^{(kr - \omega t)}}{r} \qquad \ldots (3-3)$$

حيث حذف العامل الزاوي (Angutar factor) من هذه المعادلة والذي يعتبر غير مهم هنا. ان سعة الموجة المستطيرة تتناسب مع سعة الموجة الساقطة عند نقطة ρ_{mnp} على اعتبار ان حجم البلورة صغيرة جداً والتي تعطى بـ $E_{(\vec{\rho})}$. اما الثابت C فانه يحتوي على تفاصيل المعلومات المتعلقة بمركز الاستطارة و $\frac{1}{r}$ يحفظ نقل الطاقة المستطيرة.

والآن لنحاول ان نجمع جميع الموجات المستطيرة من مراكز الاستطارة داخل البلورة ولتسجيل السعة الـكلية للموجة المستطيرة نستخدم عداد فوتونات او غشاء تصويري على مسافة (R) من نقطة الاصل (0) للبلورة .

من الشكل (8 - 3) يمكن استنتاج العلاقة التالية :

$$\vec{r} = \vec{R} - \vec{\rho}\cos\theta$$



شكل (8 - 3) العلاقة الاتجاهية بين الحزمة الساقطة والحزمة الحايدة .

وهذه العلاقة صحيحة فقط عندما يكون الغشاء التصويري على مسافة بعيدة مقارنة مع ابعاد البلورة التي تحت الدراسة .

والآن بالتعويض عن قيمة $\vec{r}$ في المعادلة (3 - 3) نحصل على

$$\vec{E}_{sc} = CE_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{\rho} - \omega t)} \cdot \frac{e^{ik(R - \rho\cos\theta)}}{R - \rho\cos\theta} \qquad \ldots (3-4)$$

بما ان ρ صغيرة جداً مقارنة بـ R وان اعلى قيمة لـ $\cos\theta$ هي واحد ، فعليه يمكن كتابة المعادلة (4 - 3) بالشكل المبسط التالي :

$$\vec{E}_{sc} = Be^{i(\vec{k}\cdot\vec{\rho} - k\rho\cos\theta)} \qquad \dots (3-5)$$

حيث

$$B = \frac{CE_0}{R} e^{i(KR - \omega t)}$$

وبما أن متجة الموجة المستطيرة $\vec{K}'$ يساوي متجة الموجة الساقطة $\vec{K}$ وان إتجاه $\vec{K}$ يعرف بأتجاه $\vec{R}$ لـذا

$$K\rho\cos\theta = \vec{K}'\cos\theta = \vec{K}'\cdot\vec{\rho} \qquad \dots (3-6)$$

ومن المعادلتين (5 - 3),(6 - 3) نحصل على

$$E_{sc} = Be^{(-i\vec{\rho}_{mnp}\cdot\Delta\vec{k})}$$

حيث $\Delta\vec{K}$ تعرف بالتغير الحاصل في متجة الموجة المستطيرة . $\vec{E}_{sc}$ تمثل الاستطارة لكل نقطة من نقاط الشبيكة بدلالة المحاور الاساسية ضمن متجة $\vec{\rho}$ وكذلك المتجة الموجي للموجة الساقطة . لايجاد محصلة سعة الموجات المستطارة عن كل نقطة من نقاط الشبيكة تجمع معاملات الطور لهذه الموجات المستطيرة أي :

$$\vec{\Omega} = \sum_{nmp} e^{(-i\vec{\rho}_{mnp}\cdot\Delta\vec{k})} \qquad \dots (3-7)$$

أن مجموع عوامل الطور ($\vec{\Omega}$) يبين الاتجاه المسموح به وعلى وجة العموم فأن عملية الاستطارة تحدث بسبب التوزيع الالكتروني لوحدة البناء لذلك فأن الاستطارة من جزء صغير من حجم البلورة (dV) يتناسب مع التوزيع الموضعي $n(\rho)$. local concentration فأن سعة الاستطارة الكلية في هذه الحالة :

$$\vec{\Omega} = \int n(\vec{\rho})\, e^{-i\vec{\rho}_{mnp}\cdot\Delta\vec{k}}\, dV \qquad \dots (3-8)$$

حيث

$$\rho_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

وللحصول على أعظم قيمة لـ Ω في المعادلة (7 - 3) يجب أن يكون مجموع عوامل الطور أكبر ما يمكن وهذا يحدث عندما

$$\vec{\rho}_{mnp}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi\epsilon \qquad \dots (3-9)$$

حيث $\in$ عدد صحيح . أو

$$(m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) . \Delta\vec{K} = 2\pi\in \qquad ... (3-10)$$

وهذا يعني أن .

$$\begin{aligned} m\vec{a} . \Delta\vec{k} &= 2\pi\in \\ n\vec{b} . \Delta\vec{k} &= 2\pi\in \\ p\vec{c} . \Delta\vec{k} &= 2\pi\in \end{aligned} \qquad ... (3-11)$$

ومن الممكن حذف الاعداد الصحيحة m, n, p من المعادلات اعلاه وكتابتها بالشكل التالي

$$\begin{aligned} \vec{a} . \Delta\vec{k} &= 2\pi h \\ \vec{b} . \Delta\vec{k} &= 2\pi k \\ \vec{c} . \Delta\vec{k} &= 2\pi l \end{aligned} \qquad ... (3-12)$$

حيث hkl اعداد صحيحة وهذه المعادلات الثلاثة تدعى بمعادلات لاوي للنهايات العظمى للحيود .

يكون حل معادلات لاوي سهلا عندما تكون المحاو ر الاساسية للبلورة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ متعامدة مع بعضها (Orthogonal) حيث

$$\Delta\vec{k} = 2\pi\left(\frac{h}{a}\vec{i} + \frac{k}{b}\vec{j} + \frac{l}{c}\vec{k}\right) \qquad ... (3-13)$$

حيث k, j, i وحدة المتجهات باتجاه محاور البلورة و l, k, h اعداد صحيحة اما اذا كانت محاور البلورة غير متعامدة فان المعادلة (13 - 3) ليست حلا لمعادلات لاوي لانه في هذه الحالة $\vec{a} . \vec{b} \neq 0$ ولهذا تحتاج الى معرفة بعض المفاهيم الخاصة بالمتجهات في الشبيكة المقلوبة .

3 - 5 الشبيكة المقلوبة

يمكن التعبير عن شروط حيود الاشعة السينية في البلورة بطريقة افضل وذلك باستخدام مفهوم الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice) ان الشبيكة المقلوبة هي لفظ شائع الاستعمال في تحليل التركيب بالاشعة السينية ان المتجهات الاساسية

للشبيكة المقلوبة $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$ تعرف بدلالة المتجهات الأساسية للشبيكة الحقيقية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ بالعلاقة التالية

$$\begin{array}{lll} \vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi & \vec{B} \cdot \vec{a} = 0 & \vec{C} \cdot \vec{a} = 0 \\ \vec{A} \cdot \vec{b} = 0 & \vec{B} \cdot \vec{b} = 2\pi & \vec{C} \cdot \vec{b} = 0 \\ \vec{A} \cdot \vec{c} = 0 & \vec{B} \cdot \vec{c} = 0 & \vec{C} \cdot \vec{c} = 2\pi \end{array} \quad \ldots (3-14)$$

نلاحظ من العمود الأول في المعادلة (14-3) ان المتجه $\vec{A}$ متعامد مع كل من ($\vec{b} \times \vec{c}$) والمتجهة العمودية على $\vec{c}, \vec{b}$ تعطى بـ ($\vec{b} \times \vec{c}$) وللتعيير (normnlizing) $\vec{b} \times \vec{c}$ لكي تحقق العلاقة $\vec{A}.\vec{a} = 2\pi$ في العمود الأول في المعادلة (14 - 3) يمكننا استخدام العلاقة (15 - 3) لتحقيق المعادلات في (14 - 3) .

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \ldots (3-15)$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

حيث $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ تمثل حجم الخلية البدائية والمتجهات $\vec{C}, \vec{B}, \vec{A}$ ستكون متعامدة اذا كانت المتجهات $\vec{c}, \vec{b}, \vec{a}$ متعامدة ايضا يمكن القول الان بان كل تركيب بلوري له شبيكتان مهمتان هما الشبيكة البلورية والشبيكة المقلوبة ان صورة الحيود للبلورة ما هي الا خريطة للشبيكة المقلوبة للبلورة بالمقارنة بالصورة المجهرية التي ما هي الا خريطة للشبيكة الحقيقية .

عند تدوير البلورة بزاوية معينة فان كلا من الشبيكتين الحقيقية والمقلوبة تدوران بالزاوية نفسها والجدير بالملاحظة ان ابعاد المتجهات في الشبيكة المقلوبة هي مقلوب الطول ($L^{-1}cm^{-1}$)ان الشبيكة البلورية هي شبيكة في الفضاء الحقيقي (real space) بينما الشبيكه المقلوبة هي شبيكة في فضاء $\vec{K}$ (K- Space)

ان النقطة في الشبيكة الحقيقية يعبر عنها كما ذكرناها سابقا بالمتجه $\vec{\rho}_{mnp}$ اي بدلالة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ وبنفس الطريقة يمكن تعريف اي نقطة في الشبيكة المقلوبة بمتجه الشبيكة المقلوبة $\vec{a}$ بدلالة المتجهات الاساسية لها $\vec{C}, \vec{B}, \vec{A}$ كما يلي :

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \qquad \ldots (3-16)$$

حيث l, k, h اعداد صحيحة . ان لكل نقطة في الشبيكة المقلوبة معنى ، ولكن النقاط المعرفة بواسطة المتجه $\vec{G}$ لها اهمية خاصة حيث $\vec{G} = \Delta\vec{K}$ والذي بدوره يعني ان معادلات لاوي للنهايات العظمى للحيود قد تحققت في هذه الشبيكة ولكن لنرى اهمية متجه $\vec{G}$ نجري الضرب غير الاتجاهي الاتي :

$$\vec{G} \cdot \vec{\rho}_{mnp} = (h\vec{A} + kB + l\vec{C}) \cdot (m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) = 2\pi\epsilon \qquad \ldots (3-17)$$

حيث ϵ عدد صحيح وبذلك قد حققت $\vec{G}$ شرط الحيود كما في الشبيكة الحقيقية .

3 - 7 الحيود في الشبيكة المقلوبة وكرة ايوالد

لقد ذكرنا في البنود السابقة ان هناك شرطين يجب ان يتحققا للحزم الحايدة وهما $K = K', \omega = \omega'$ وهذا يعني ان الطاقة الكلية تبقى محفوظة في عملية الاستطارة المرنة حيث من الممكن الحصول على العلاقة $\vec{G} = \Delta\vec{K}$ والتي تعني

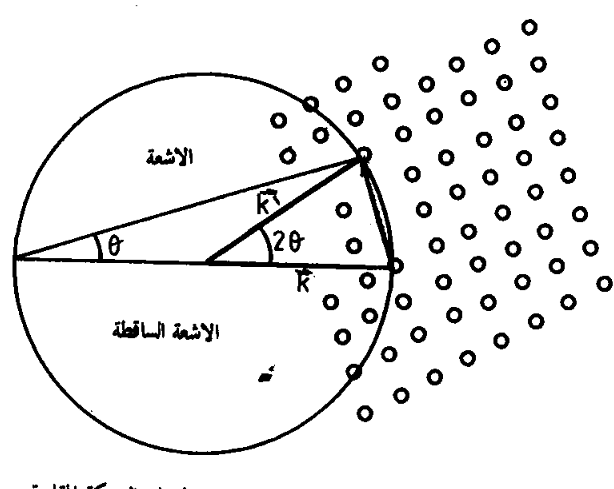
$$\vec{K}' - \vec{K} = \vec{G} \qquad \ldots (3-18)$$

او

$$2\vec{K} \cdot \vec{G} + |G|^2 = 0 \qquad \ldots (3-19)$$

وهذه المعادلة تكافيء معادلة براك في الشبيكة الحقيقية $2d_{hkl} = \sin\theta$. وان المعادلة (3.19) هي معادلة براك للشبيكة المقلوبة والتي لها بناء هندسي بسيط . ان العالم ايوالد Ewald اول من استخدم هذا البناء الهندسي لتوضيح عملية الاستطارة في الشبيكة المقلوبة بالشكل التالي : لنفرض ان النقاط المرسومة في الشكل (3 - 9)نقاط في الشبيكة المقلوبة . نرسم متجه $\vec{K}$ $\left(K = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$ بحيث يكون اتجاهها باتجاه الاشعة الساقطة ويمر

بنقطة الاصل (O) المقلوب الشبيكة ثم نرسم كرة نصف قطرها $\vec{K}$ مركزها نقطـــة الاصل . ان اتجاه الاشعة الناتجة من استطارة الاشعة الساقطة يتمثل بواسطة نقـــاط الشبيكة المقلوبة التي تقع على سطح الكرة . اي ان الكرة كما هي مرسومة في الشكل (9 - 3) تمر بنقطة تصل نهاية $\vec{K}'$ بواسطة متجهة الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$.



الشكل (9 - 3) بناء كرة ايوالد في الشبيكة المقلوبة

8 - 3 مناطق بريلوين

تعرف منطقة بريلوين بخلية ويكنر - سيتز (Wegner-Seitz) في الشبيكة المقلوبة (وقد عرفنا خلية ويكنر - سيتز في الشبيكة الحقيقية في البند 1 - 2). ان منطقة بريلوين (Brilloun zone) تعطي تفسيرا هندسيا لشروط الحيود المتمثلة بالمعادلة (19 - 3). وبما ان كلا من $\vec{G}$ و $\vec{G}$ - متجهتان في الشبيكة المقلوبة لذا يمكن كتابة المعادلة (19 - 3) بالشكل التالي

$$\vec{K} \cdot \frac{1}{2}\vec{G} = \left| \frac{1}{2} G \right|^2 \qquad \ldots (3-20)$$

من الشكل 3.10 نلاحظ ان المستويين (1) , (2) عموديين على منصفات OD , OC والان اي متجه موجي يوصل نقطة الاصل بالمستوي (1) يمثل المتجه $\vec{K}_1$ يحقق المعادلة (20 - 3) اي

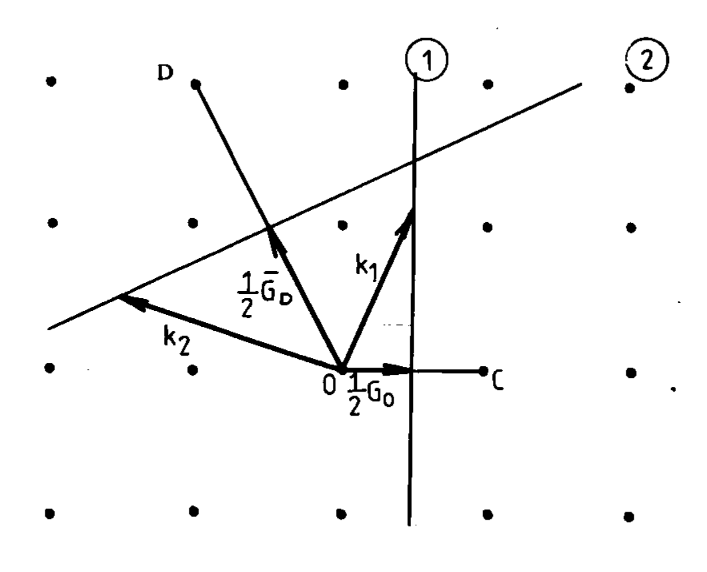
$$\vec{K}_1 \cdot \left(\frac{1}{2}\vec{G}_c \right) = \left| \frac{1}{2} G_c \right|^2 \qquad \ldots (3-21)$$

وبالطريقة نفسها أي متجه موجي من نقطة الأصل يصل بالمستوى 2 مثل $\vec{K}_2$ ايضاً يحقق المعادلة (20 - 3) اي ان

$$\vec{K}_2 \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{G}_D \right) = \left| \frac{1}{2} G_D \right|^2 \qquad \dots (3-22)$$

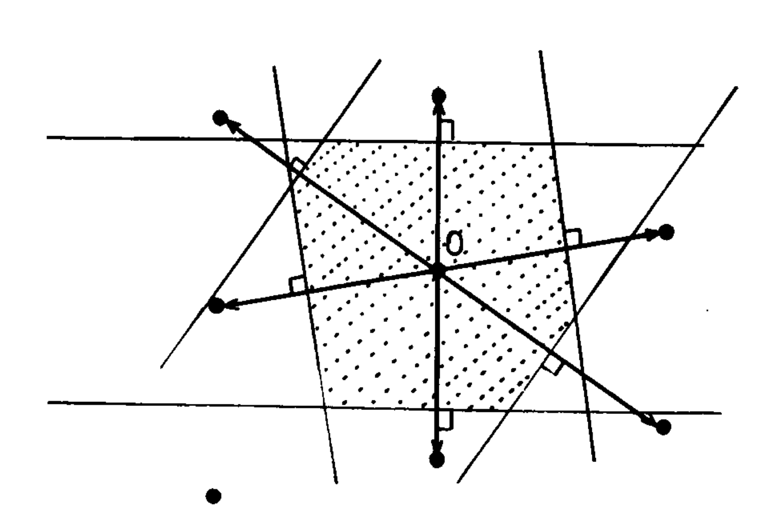
وبصورة عامة فأن اي متجه يرسم من نقطة الأصل للشبيكة المقلوبة ليصل أياً من هذين المستويين فسيحقق شرط الحيود . وهذه المستويات المرسومة تكون حدود منطقة بريليون .

من البديهي أن متجهات الشبيكة المقلوبة لها طول محدود واتجاه معين بالنسبة للمتجهات $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ الخاصة بالنموذج الذي تحت الدراسة . ان الاشعة السينية الساقطة على النموذج ستحيد اذا حقق متجه الموجة شرط الحيود واتجاه الشعاع المحاد سيكون $\vec{K} + \vec{G}$.



الشكل (10-3) المستويان 1 و 2 عموديان على منصفات OC و OD . واي متجه موجي مثل $\vec{K}$ تحقق معادلة

ان مجموعة المستويات التي هي المنصفات العمودية على المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة تحدد منطقة بريلوين واءن منطقة بريلوين الاولي هي اصغر حجم محصور داخل المستويات المنصفة للمتجهات المرسومة من نقطة الاصل الى نقاط الشبيكة المقلوبـــة. ولرسم منطقة بريلوين في الشبيكة المقلوبة يمكن ان تتبع نفس الاسلوب المتبع في حالة رسم خلية ويكنر وسيتز في الشبيكة الحقيقية والشكل 11-3 يوضح تعين منطقـة بريلوين الاولى للشبيكة المائلة (Oblique luttice).



الشكل (11 - 3) منطقة بريليون للشبيكة المائلة في بعدين (خلية ويكنر – ستز في الشبيكة المقلوبة).

3 - 9 الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط :

المتجهات الأنتقالية الأساسية لشبيكة المكعب البسيط في الفضاء الأعتيادي تكون على الشكل التالي

$$\vec{a} = a\vec{i}$$
$$\vec{b} = a\vec{j}$$
$$\vec{c} = a\vec{k}$$

وحجم الخلية البدائية لشبيكة المكعب البسيط يساوي $(\vec{a}.\vec{b} \times \vec{c} = a^3)$
اما المتجهات الأنتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة يمكن اعستنباطها من العلاقات (15 - 3) اي :

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a}.\vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$$

وبنفس الطريقة

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{a}\vec{k}$$

ولهذا فأن الشبيكة المقلوبة هي أيضاً شبيكة مكعبة بسيطة بثابت الشبيكة $\frac{2\pi}{a}$
اما حدود منطقة بريلوين الأولى فهي المستويات المنصفة للمتجهات الستـــة ادناه :

$$\pm \frac{1}{2}\vec{A} = \pm \frac{\pi}{a}\vec{i}$$

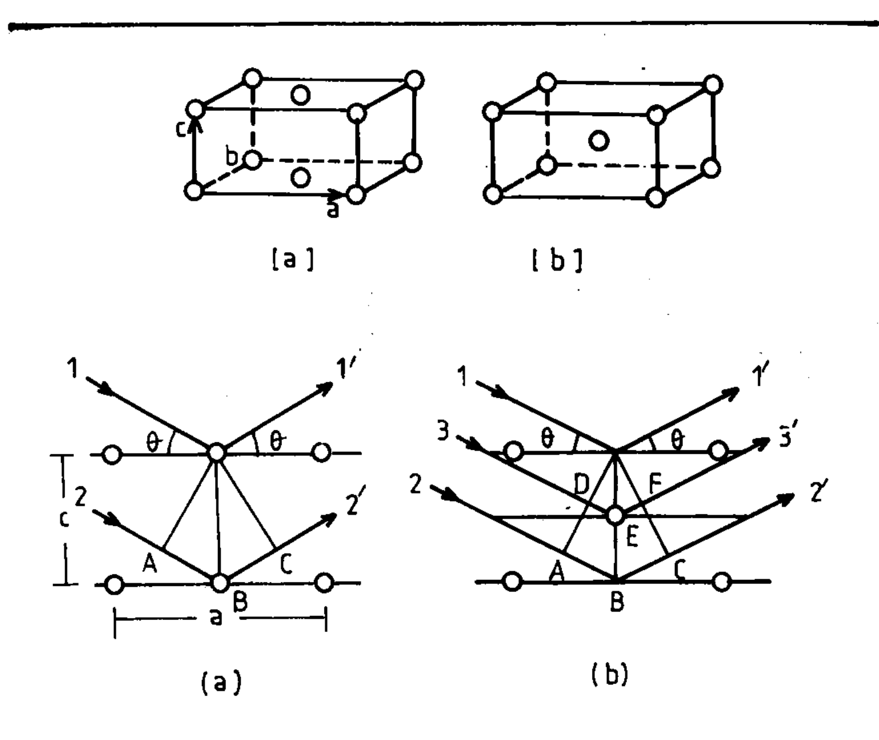
$$\pm \frac{1}{2}\vec{B} = \pm \frac{\pi}{a}\vec{j}$$

$$\pm \frac{1}{2}\vec{C} = \pm \frac{\pi}{a}\vec{k}$$

ان لمستويات الستة تحدد مكعبا طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$ وحجم $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ ، وهذا المكعب هومنطقة بريليون الأولى لشبيكة المكعب البسيط . (جد متجهات الانتقالية الاساسية لشبيكة المقلوبة للخلية المتمركز الأوجه FCC وكذلك متمركز الجسم FCC)

3 - 10 عامل التركيب للاساس

سبق في دراستنا للحيود ولغرض السهولة اعتبرنا ان البلورة متكونة من نقاط الشبيكة فقط اي ان الشبيكة برافيزية وهذه النقاط تعمل كمراكز للأستطارة . ولم يذكراي شيء عن احتمال ان هذه النقاط قد تكون حاوية على اكثرمن نوع واحد من الذرات . ان شدة الحزمة الحايدة تعتمد على محتويات مركز الأستطارة (الأساس) اي على عدد الذرات الموجودة في الأساس وموضع الذرة وتوزيع الألكترونات على هذه الذرة . ولتوضيح ذلك يمكننا الرجوع الى الشكل (12 - 3) .



الشكل 12 - 3 الحيود من المستويات (001) لخلايا (a) متمركزة القاعدة (b) متمركز الجسم

لوفرضنا ان الانعكاسات هي من المستويات المتوازية (001) كما في الشكل (3-12a)
الخاصة بخلية متمركزة القاعدة وان قانون براك متحقق وهذا يعني ان فرق المسار ABC بين الشعاعين $2', 1'$ يساوي طول موجة واحدة ، اي ان الشعاعين $2', 1'$ بنفس الطور وهكذا فأن الحزمتين $2', 1'$ هما من نفس الطور وبذلك يحدث تداخل بناء (تقوية)الاتجاه المبين ، أما بالنسبة للخلية متمركزة الجسم (لاحظ الشكل3-12b) حيث ان الشعاعين $2', 1'$ في نفس الطور لان فرق المسار ABG يساوي طول موجة واحدة أيضاً ، ولكن في هذه الحالة يوجد مستوأخرمن الذرات بين لمستويات (001) في منتصف المسافة البينية . وليس صعباً أن نستنتج أن فرق المسار بين $3', 1'$ هو نصف المسار (ABC)اي نصف طول الموجة ، لذلك فأن $1', 3'$ تكونان في طورين متعاكسين تماماً ، وهذا يسبب تداخلاً اتلافياً ويمكن التدرج بنفس الاسلوب بالنسبة للمستويات الأخرى . اي أن $4'$ تلافي 2 وهكذا ... وهذا يعني انه لا وجود للانعكاس (100) في نظام متمركز الجسم وكل ما تقدم يبرهن لنا ان ترتيب الذرات داخل الاساس يؤثر في شدة الحزمة المستطارة . ان هدفنا في هذا البند ايجاد علاقة رياضية بين شدة الحزمة الحايدة ومواقع الذرات داخل الاساس والذي سيؤدي الى استنتاج عامل جديد هوعامل تركيب (structure factor) للاساس .

لنفرض ان وحدة الخلية لبلورة ما تحتوي على s من الذرات وان موقع الذرة يعرف بالمتجهه

$$\vec{\rho}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c} \qquad \ldots(\ -23)$$

بالنسبة الى نقطة الشبيكة المعرفة بـ

$$\vec{\rho}_{mnp} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

والتي هي نقطة الاصل لانطلاق المتجة $\vec{\rho}_j$ مع التذكير بأن نقطة الاصل الرئيسية للبلورة هي ρ_{000} .وان موقع الذرة داخل الخلية بالنسبة الى نقطة الأصل هي :

$$\vec{\rho}_j + \vec{\rho}_{mnp}$$

ومن المعلوم ان الالكترونات لا تتركز في نقطة واحدة بل تكون موزعة حول النواة لذا يمكن التعبير عن توزيع الالكترونات داخل البلورة بـ (اءضافة التراكـــب) (supperposion) لدالة توزيع الالكترونات C_j لكل ذرة .

ان الدالة $C_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j - \vec{\rho}_{mnp})$ تعرف بكثافة الالكترونات عند نقطة معينة من ذرة j داخل الخلية لذلك فأن التركيز الكلي للالكترونات $n(\vec{\rho})$ في البلورة يأخذ الصيغة التالية

$$n(\vec{\rho}) = \sum_{mnp} \sum_{j=1}^{s} C_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j - \vec{\rho}_{mnp}) \qquad \ldots (3-24)$$

ان عملية الجمع على j تعني عدد الذرات الموجودة داخل الاساس s ولكن الجمع على mnp هو العدد الكلي لنقاط الشبيكة داخل الخلية وليكن M^3 . سبق ان ذكرنا ان سعة الموجة المستطيرة $\vec{\Omega}$ تعطى بـ

$$\vec{\Omega} = \int_{cell} n(\vec{\rho}') e^{-i\vec{\rho}\cdot\Delta k} dV$$

من الشكل 13 - 3 نلاحظ ان

$$\vec{\rho}' = (\vec{\rho} - \vec{\rho}_j - \vec{\rho}_{mnp})$$

وبذلك يمكن كتابة المعادلة (25 - 3) بالشكل التالي

$$\vec{\Omega} = \sum_{mnp} \sum_{j} \int_{cell} C_j(\vec{\rho}') dV . e^{-i[\vec{\rho}' + (\vec{\rho}_j + \vec{\rho}_{mnp})]\cdot\Delta\kappa} \qquad \ldots (3-25)$$

$$= \sum_{mnp} \sum_{j} f_j e^{-i(\vec{\rho}_j + \vec{\rho}_{mnp})\cdot\Delta\vec{\kappa}}$$

حيث

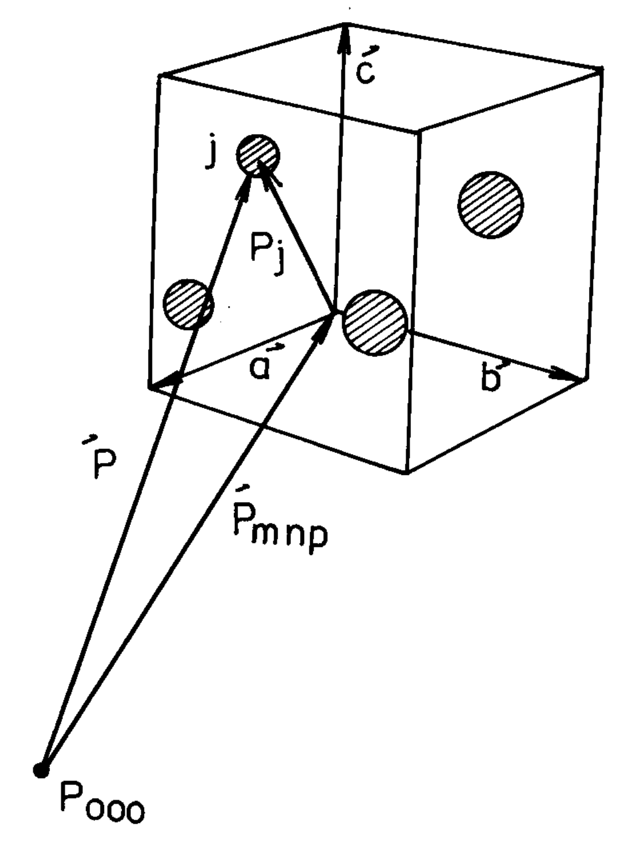
$$f_j = \int_{cell} C_j(\rho') dV e^{-i\vec{\rho}\cdot\Delta\kappa} \qquad \ldots (3-26)$$

و f_j يعرف بـ عامل الشكل للذرة (Form factor of atom).
ومن الممكن كتابة الاستطارة بالشكل التالي

$$\vec{\Omega} = M^3 \vec{S}_{hkl} \qquad \ldots (3-27)$$

حيث S_{hkl} عامل التركيب للاساس ويعطي بالصيغة الرياضية التاليـــة :

$$\vec{S}_{hkl} = \sum_{j} f_j e^{-i(\vec{\rho}_j\cdot\Delta k)} \qquad \ldots (3-28)$$



شكل 13 – 3 موضع الذرة داخل الخلية بالنسبة للبلورة

ومن شروط التداخل للحيود $\Delta\vec{K} = \Delta\vec{G}$ نحصل على

$$\vec{S}_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-i(\vec{\rho}_j \cdot \vec{G})} \qquad \ldots (3-29)$$

حيث

$$\vec{G} \cdot \vec{\rho}_j = 2\pi (x_j h + y_j k + z_j l) \qquad \ldots (3-30)$$

لذا يمكن كتابة عامل التركيب للانعكاس (hk$l$) بالشكل التالي

$$S(hkl) = \sum_j f_j \, e^{-2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)} \qquad \ldots (3-31)$$

ليس من الضروري أن يكون عامل التركيب عدداً حقيقياً . على أي حال فان شدة الاستطارة تساوي SS^* عندما يكونS^*المرافق المعقد(Complex conjucate). ومن الجدير بالذكر ان المعادلة (31 - 3) هي من المعادلات المهمة في علم الحيود من البلورات حيث يمكننا حساب شدة الحيود لاي مستوى(hkl) واذا عرفنا مواقع الذرات في الاساس . ويمكننا كذلك أن نتنبأ بحدوث أوعدم حدوث ظاهرة الحيود في أي مستوى معين .

11 - 3 حساب عامل التركيب S_{hkl} للاساس

سنحاول في هذا البند تطبيق المعادلة(31-3) لحساب عامل التركيب للبلورة لبعض الانظمة البلورية ومنها :

(a) -أن أبسط وحدات الخلية في البلورة هي تلك التي فيها ذرة واحدة ذات احداثيات (000)، وبذلك يكون عامل التركيب .

$$S_{hkl} = f\,e^{2\pi i(0)} = f \qquad \dots (3-32)$$
$$S^2 = f^2$$

حيث أن S^2_{hkl} لاتعتمد على l, k, h وهي نفسها لجميع الانعكاسات .

(b) - لنحسب عامل التركيب S_{hkl} لوحدة خلية متمركز الجسم BCCوالذي يحوي نوعاً واحداً من الذرات . والرجوع الى الشكل (23a-1)يبين أن هناك نقطتين في هذا النوع من التركيب البلوري واحداثياتهما هي (0, 0, 0,)،$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ لـــذا .

$$S_{hkl} = S|_{000} + S|_{\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}$$

$$= f(1 + e^{-\pi i(h+k+l)}) \qquad \dots (3-33)$$

اذا كان القوس ($h + k + l$) يساوي عدداً زوجياً فأن :

$$S_{hkl} = 2f$$

وهذا يعني أن $S^2 = 4f^2$وتحدث عملية الانعكاس .

أما اذا كان القوس $(h + k + l)$ يساوي عدداً فردياً فان $S = 0$ وبذلك $S^2 = 0$ وهذا يعني أنه الانعكاس لن يحدث .

مثـــال :

اذا إعتبر التركيب البلوري من نوع متمركز الجسم يحتوي على المستويات ((100)) و(110) و((111)) و (200) و(210) و (220) وتحتوي على نوع واحد من الذرات اذا اسقطت الاشعة السينية على هذه البلورة ففي أي من هذه المستويات سيحدث الانعكاس ؟

الجـــواب :

المستويات	$(h + k + l)$	S	الملاحظـــة
(100)	فردي	0	لايوجد الانعكاس
(110)	زوجي	2f	يوجد انعكاس
(111)	فردي	0	لايوجد انعكاس
(200)	زوجي	2f	يوجد الانعكاس
(210)	فردي	0	لايوجد انعكاس
(220)	زوجي	2f	يوجد إنعكاس

جدير بالملاحظة أن القانون اعلاه يطبق على خلايا من نوع متمركز الجسم التي تحتوي على نوع واحد من الذرات أي أن عامل شكل الذرة (f_j) لذرتيها . متساويان . ففي بلورة كلوريد السيزيوم $CsCl$ مثلاً والتي من نوع متمركز الجسم فأن التركيب البلوري لمثل هذه الذرات يتكون من ذرات Cs المرتبة بشكل مكعب بسيط ، وذرات Cl المرتبة بشكل مكعب بسيط أيضاً ولكنهما متداخلان مع بعضهما ، حيث يزيح الشبيكة الاولى عن الثانية مسافة تساوي نصف قطر المكعـــب .

عند دراسة الحيود لهذه البلورة نلاحظ بأن الانعكاس (100) يظهر خلافاً لما ذكرنا اعلاه . التعليل الفيزياوي لهذه الحالة هي أن عامل الشكل للذرة f_j (لذرات Cl) لا يساوي f_j (لذرات Cs) وعليه عند تطبيق المعادلة (33 – 3) يجب ان نأخذ هذه الحقيقة بنظر الاعتبار ولاتكون الشدة صفراً ($S \neq 0$) بل ستكون لها قيمة محددة .

(c)-- حساب عامل التركيب S_{hkl} لوحدة الخلية متمركز الاوجةFCCالمبينة في الشكل(23b -1)وان وحدة الخلية هذه تحتوي على أربع ذرات عند الاحداثيات التالية ($(0, 0, 0)$, $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$, $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$, $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ وعلية

يمكن كتابة S_{hkl} بالشكل التالي :

$$S_{hkl} = S|_{000} + S|_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}0} + S|_{\frac{1}{2}0\frac{1}{2}} + S|_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$$

ومنهـا

$$S_{hkl} = f\left[\,1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}\,\right] \qquad \ldots (3-34)$$

فأذا كانت الدلائل (hkl) جميعها زوجية أوفردية فيكون مجموع الحدود $(l+k)$ و $(h+k)$, $(h+l)$ عدداً حقيقياً زوجياً وأن كل حد من الحدود اعلاه له قيمة تساوي واحداً وبذلك يكون

$S = 4f$ $S^2 = 16f^2$	عندما يكون الدلائل جميعها زوجية – أوفردية .

واذا كانت الدلائل (hkl) خليطاً من الاعداد الزوجية والفردية فيكون مجموع الحدود الاسية في المعادلة اعلاه هو (-1) . لنفرض أن l, h اعداد زوجية ,k عدد فردي مثل (012) فيكون :

$$S_{hkl} = f\,[\,1 - 1 + 1 - 1\,] = 0$$
$$S = 0$$
$$S^2 = 0$$

وبعبارة أخرى لايحدث انعكاس من المستوى (012) .

لنأخذ تركيباً بلوري متمركز الاوجة يحتوي على المستويات (100) , (110)

(111), (200), (210), (220), (112) ولنختبر ايا من هذه المستويات تسمح بالانعكاس

المستويات	(h, k, l)	S	الملاحظات
100	مختلط	0	لايحدث انعكاس
110	مختلط	0	لايحدث انعكاس
111	فردي	4f	يحدث الانعكاس
200	زوجي	4f	يحدث الانعكاس
210	مختلط	0	لايحدث الانعكاس
220	زوجي	4f	يحدث الانعكاس
112	مختلط	0	لايحدث الانعكاس

وهناك نقطة مهمة يجب ملاحظتها عند حساب عامل التركيب S_{hkl} هو انه لايعتمد على حجم وحدة الخلية او شكلها بل على محتويات الخلية .

يمكن توضيح ما تقدم في دراسة بلورة كلوريد الصوديوم NaCl حيث وحدة الخلية لهذه بلورة هي مكعب متمركز الاوجه FCC يحوي على 4 ذرات من Na و 4 ذرات من Cl واحداثيات هذه الذرات في وحدة الخلية هي :

ذرة الصوديوم : $0\,0\,0,\quad \frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0,\quad \frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2},\quad 0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}$

ذرة الكلور : $\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2},\quad 0\,0\,\frac{1}{2},\quad 0\,\frac{1}{2}\,0,\quad \frac{1}{2}\,0\,0$

لدينا هنا نوعان من الذرات Na و Cl لذلك يجب ان نستعمل عامل شكل الذرة (f_j) لكل من هاتين الذرتين في مواقعها الصحيحة في معادلة حساب عامل التركيب(S_{hkl})

$$S_{hkl} = f_{Na}e^{2\pi i(0)} + f_{Na}e^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{k}{2})} + f_{Na}e^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{l}{2})} + f_{Na}\,e^{2\pi i(k/2+\frac{l}{2})}$$

$$+ f_{cl}e^{2\pi i(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2})} + f_{cl}{}^{2\pi i(\frac{l}{2})} + f_{cl}e^{2\pi i(k/2)} + f_{cl}e^{2\pi i(h/2)}$$

$$S_{hkl} = f_{Na}[1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}] + f_{Cl}[e^{\pi i(h+k+l)} + e^{\pi il} + e^{\pi ik} + e^{\pi ih}]$$

وبما ان شبيكة الصوديوم وكذلك الكلور تخضع للتناظر الانتقالي ذات الاوجه المتمركزة وهذا يعني بالامكان اخراج العوامل المشتركة من بين الاقواس وهذا يسهل الامر كثيرا، حيث

$$S_{hkl} = [f_{Na} + f_{Cl}e^{\pi i(h+k+l)}][1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}] \quad \ldots (3\text{–}35)$$

هنا الحدود المتماثلة من عملية الانتقال الخاص بمتمركز الاوجه متضمنة في الحد الثاني من المعادلة (35–3) . وهذا الحد يساوي صفرا للدلائل المختلطة و (4) للدلائل غير المختلطة . وان هذه الحقيقة لوحدها تبين ان بلورة كلوريد الصوديوم هي متمركزة الاوجه اي ان للدلائل المختلطة . $S_{hkl} = 0$

وبالنسبة للدلائل غير المختلطة (اما زوجية او فردية) فان

$$S_{hkl} = 4[f_{Na} + f_{Cl}e^{\pi i(h+k+l)}] \quad \ldots$$

اذا $(h + k + l)$ عدداً زوجياً

$$S_{hkl} = 4[f_{Na} + f_{Cl}]$$

$$S^2 = 16[f_{Na} + f_{Cl}]^2$$

اذا $(h + k + l)$ عددا فرديا

$$S_{hkl} = 4(f_{Na} - f_{Cl})$$

$$S^2 = 16(f_{Na} - f_{Cl})^2$$

في هذه الحالة يكون عدد الذرات لوحدة الخلية اكثر من اربعة ومع ذلك تبقى وحدة الخلية متمركزة الاوجه . مع ان عدد الذرات يزيد عن اربعة ولكن ذلك لم يؤد الى عدم حدوث الانعكاس في بعض المستويات ولكن أدت هذة الزيادة في عدد الذرات الى نقصان في شدة الانعكاسات لبعض المستويات .

3 – 12 حيود الالكترونات

لقد اشرنا في بداية هذا الفصل ، بان هناك انواعا اخرى من الحزم الشعاعية اضافة الى الاشعة السينية استخدمت لفحص الترتيب البلوري مثل الحزمة الالكترونية (Electron beam) والحزمة النيوترونية (Neutron beam) . ومن متطلبات الحزم المستخدمة

لدراسة البلورات اولا ، يجب ان يكون لها خاصية موجية وذلك لتداخل الحزم الحايدة بصورة متشاكهة Coherence واعطاء معلومات عن تركيب المادة ثانيا.ان الطول الموجي للحزمة المستخدمة يجب ان يكون مقاربا من طول ثابت الشبيكة للبلورة ان الحزمة الالكترونية تملك هاتين الخاصيتين.

عند سقوط الحزمة الالكترونية على البلورة فأنها تعاني انعكاس براك وتطبق عليها نفس القوانين المطبقة للاشعة السينية . أن الالكترونات تمتلك خاصة موجية وأن طاقتها (E) تتناسب عكسياً مع مربع طول موجتها (λ) وفق العلاقة التالية

$$E = \frac{h^2}{2m_e \lambda^2} \qquad \ldots (3\text{–}36)$$

حيث m_e كتلة الالكترون المستقر ($m_e = 0{\cdot}911 \times 10^{-27} g$) ويمكن كتابة المعادلة أعلاه بوحدات مختبرية Laboratory unit بالشكل التالي :

$$\lambda = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}} \qquad \ldots (3\text{–}37)$$

أن التفاعل المسؤول عن استطارة الالكترونات هو التفاعل الناتج بين الالكترونات والمجال الموجود حول كل ذرة داخل المادة الصلبة ومنشأ المجال حول الذرة هو نواة الذرة أو الألكترونات المدارية .. وبما أن الألكترونات جسيمات مشحونة فانهـا تتفاعل بشدة مع المواد وتخترقها مسافة قصيرة نسبياً داخل سطح المادة وهذا يجعل دراسة تركيب المواد الصلبة بواسطة الحزمة الالكترونية مقتصراً على سطح المعادن والاغشية الرقيقة مثل :

1- دراسة سطوح المعادن أوالسبائك المساعدة في التفاعلات الكيمياوية في الصناعات

2- دراسة العناصر الخفيفة العالقة على سطوح المعادن الثقيلة مثل الاوكسجيـن والهايدروجين على سطح النيكل وغيرها من المعادن .

3- دراسة الاهتزازات الحرارية للذرات في سطرح المعادن .

4- دراسة التأكل والتقشيط (Etching) وتأكسدسطوح المعادن وأشباه الموصلات الصناعية .

13 - 3 حيود النيوترونات .

يتم الحصول على النيوترونات الحرارية عادة في قناة من اقنية المفاعل النووي لاغراض دراسات الحيود . وهذه النيوترونات لها طيف من الطاقة لذلك تحرر من خلال مرشح لغرض الحصول على حزمة نيوترونات ذات موجة أحادية التردد وهذا النوع من الحزمة يستعمل لغرض دراسة حيود في المواد المختلفة . وطاقة النيوترون (E) تتناسب عكسياً مع مربع طول موجتة (λ_d) وفق العلاقة التالية :

$$E = \frac{h^2}{2M_n \lambda_d^2} \quad \ldots (3\text{-}38)$$

حيث M_n كتلة النيوترون المستقر ($M_n = 1{\cdot}675$). ويمكن كتابة معادلة (38-3) بوحدات مختبرية بالشكل التالي :

$$\lambda \text{ (انكستروم) } = \frac{0{\cdot}28}{\sqrt{E\,(eV)}} \quad \ldots (3\text{-}39)$$

وتكون قيمة $\lambda = 1A^{\circ}$ عندما $E = 0{\cdot}08eV$ وطول الموجة المستخدمة لدراسة الحيود تكون عادة بين $1 - 2A^{\circ}$ أو بعبارة اخرى بنفس طول موجة الأشعة السينية . وتجري دراسة الحيود بواسطة جهاز يدعى جهاز (المحيد النيوتروني) (Neutron - Diffracto meters) حيث تقاس شدة الحيود من البلورة بواسطة كاشف خاص مملوء بغاز ثالث فلوريد البورون (BF_3) . يفضل دراسة البلورات بواسطة النيوترونات على دراستها بواسطة الأشعة السينية للاسبـاب التاليــة :

1 - يمكن دراسة الجزئيات الخفيفة مثل الهايدروجين بواسطة حيود النيوترونات بدقة كبيرة في حين تكون دراسة هذه العناصر الخفيفة بالاشعة السينية مفتقرة الى الدقة وذلك بسبب قلة الالكترونات في مدارها الخارجي .

2 - دراسة الحيود بالنيوترونات تميز بين النظائر المختلفة الموجودة في تركيب الصلب بينما لايمكن تمييز ذلك بالاشعة السينية .

3 - ومن اهم تطبيقات جيود النيوترونات هي دراسة الخواص المغناطيسية للمواد الصلبة المغناطسية وبدرجة كبيرة من الدقة حيث للنيوترون خاصية البرم Spin . (تعمل كمغناطيسي صغير جداً) وكذلك تعمل الالكترونات برماً مغناطيسياً وعلية

تستطيع النيوترونات من الاستطارة مغناطيسياً . لذا فمن الممكن إستخدام حيود النيوترونات للكشف عن نوع المغناطيسية في البلورات .

4 - حيود النيوترونات يعطي معلومات أدق من الأشعة السينية عند استخدامها لدراسة إهتزاز الشبيكة للبلورة أن الصعوبات التي ترافق تقنية حيود النيوترونات إنها بحاجة الى وجود مفاعلات نووية (nuclear reaetors) والتي من الصعب الحصول عليها في كثير من المختبرات و بما أن النيوترونات جسيمات متعادلة فأن عملية الكشف عنها أصعب من الالكترونات والأشعة السينية .

الاسئلة

3-1 لقد تم الحصول على نمط الحيود لمادة الرصاص (Pb) بأستخدام حزمة ذات الطول الموجي $\lambda = 1.54A^{\circ}$ لوحظ انعكاس (220) عند زاوية براك $\theta = 32^{\circ}$. جد ثابت الشبيكة ونصف قطر الذرة الرصاص .

3-2 لماذا تعتبر الحزمة النيوترونية أكثر فائدة من الحزمة الالكترونية لدراسة التركيب البلوري .

اذا علمت أن ضلع وحدة الخلية في نظام المكعب هي $2.62A^{\circ}$ جد زاوية براك المناظر للانعكاسات من المستويات (110) , (111) , (200) , (210) , (211) و (100) , علماً أن الطول الموجي للاشعة المستخدمة هو $1.54A^{\circ}$.

3-4 أي من الانعكاسات الاتية تتلاشى في شبيكة متمركز الجسم ((220) ,(211) ، (100) , (110) , (111) , (200) , (210) , . اجب نفس السؤال بالنسبة للشبيكة متمركز الاوجة .

3-5 كلوريد السينريوم (CsCl) تتبلور بتركيب متمركز الجسم (BCC) حيث نوع من الذرات تقع عند زويا الخلية والاخرى في مركز الخلية . احسب عامل التركيب للبلورة . اذا علمت أن $f_{Cs} = 3f_{Cl}$. ثم ناقش اجابتـك .

3-6 الوحدة الخلية من نوع السداسي . لها الابعاد التالية $a = 4A^{\circ}$.

$\gamma = 120 \ , \alpha = \beta = 90 \ , C = 8^{\circ}A \ , b = 6^{\circ}A$

جـد :

1 - المتجهات الاساسية C,B,A للشبيكة المقلوبة .

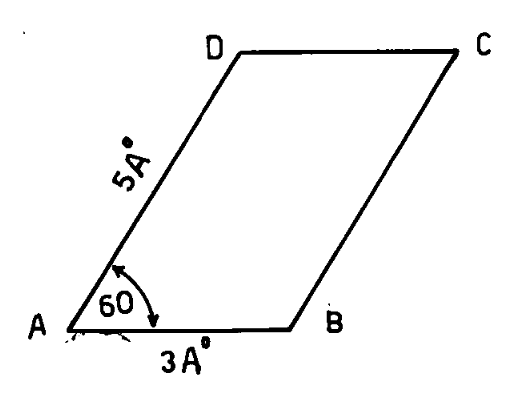
2 - حجم وحدة الخلية الاعتيادية والمقلوبة .

3 - المسافة البينيـة للمستـويات (210) .

4 - زاوية بـراك للمستـويات 210 .

3-7 شبيكة ذات بعدين تتكون من تكرارية المستوازي المستطيل ABCD كما هو موضح في الشكل والتي فيها $AD = BC = 5A^{\circ} \ , AB = CD = 3A^{\circ}$ وزاوية $BAD = 60$.ارسم مساحة صغيرة من الشبيكة الاعتيادية والشبيكة المقلوبة .

لها ثم احسب طول المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبــة .



3.4 المتجهات الاساسية للشبيكة السداسية Hexagonal lattice هي .

$$\vec{a} = (3^{\frac{1}{2}} a/2)i + \frac{a}{2} j$$

$$\vec{b} = -\frac{\sqrt{3}}{2} ai + \frac{1}{2} aj$$

$$\vec{c} = ci$$

(a) بين أن حجم وحدة الخلية هو

$$\left(V_p = \frac{\sqrt{3}}{2} a^3 c \right)$$

(b) بين أن المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة هــي :

$$\vec{A} = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}\ a} \right) i + \left(\frac{2\pi}{a} \right) j$$

$$\vec{B} = -\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}\ a} \right) i + \left(\frac{2\pi}{a} \right) j$$

$$\vec{C} = \left(\frac{2\pi}{a} \right) k$$

الفصل الرابع

حركية الشبيكة والخواص الحرارية للعوازل

4 - 1 المقدمة

تعني حركية الشبيكة دراسة اهتزازات الشبيكة البلورية لماذا ندرسها ؟ لان كثيراً من خواص المواد الصلبة مثل الخواص الحرارية والبصرية والكهربائية تعتمد على حركية الشبكة .

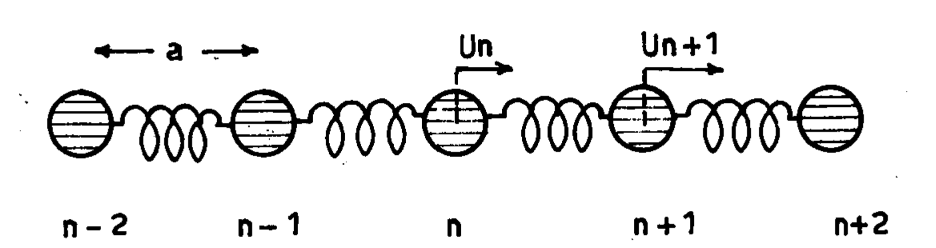
في الفصول السابقة اعتبرنا الشبيكة البلورية متكونة من ذرات مستقرة في اماكنها وان البلورة متكونة من مجموعة من الذرات مرتبة بشكل منتظم ودوري (Periodic) ولم ياخذ بنظر الاعتبار اهتزاز هذه الذرات من مواقعها والتأثيرات المتبادلة بين هذه الذرات .

وفي هذا الفصل سنأخذ هذا الاهتزاز بنظر الأعتبار ، حيث ان كل ذرة داخل البلورة تهتز بحركة توافقية بسيطة دون ان تنتقل الذرة من موقعها الى موقع اخر في البلورة ، وتعرف هذه الحركة باهتزازات الشبيكة .

2 - 4 اهتزاز الشبيكة احادية الذرة في بعد واحد

ان الشكل 4-1 يبين شبيكة احادية الذرة اي انها تحتوي على نوع واحد من الذرات وثابت الشبيكة لها يساوي a . عندما تكون الشبيكة في حالة الاستقرار فان كل ذرة مستقرة تماماً في موقعها في الشبيكة وعندما تتذبذب الشبيكة فان كل ذرة تزاح عن موقعها بمقدار صغير وبما ان الذرات تتفاعل فيما بينها ،فأن الذرات المتجاورة تتاثر بهذه الحركة بنفس الوقت بحيث يجب علينا مراعاة الشبيكة ككل . فلو اخذنا ذرة n كمرجع فان القوة المسلطة (F_n) عليها نتيجة التفاعل مع ذرة (n + 1) تتمثل بـ

$$F_n = \alpha(U_{n+1} - U_n) \quad \ldots(4\text{-}1)$$



شكل 4-1 سلسلة من الذرات في بعد واحد .

حيث U_n ، U_{n+1} هي ازاحة الذرتين n , n + 1 على التوالي و $U_{n+1} - U_n$ هي الازاحة النسبية للذرتين والعامل α هو ثابت التفاعل او ما يعرف بـــ (Hooks constant) ومن المعروف ان القوة تتناسب مع الازاحة النسبية وهذا يعرف بالتقريب التوافقي (Harmonic approximation) وهذا التقريب الذي ينطبق بصورة جيدة على حركة الذرات بشرط ان تكون الازاحة صغيرة جداً وهو مكافيء لقانون هوك المعروف في المرونة ،وكأن الذرات تكون مرتبطة فيما بينها بنوابض مثالية .

ان القوة المسلطة على ذرة n من قبل ذرة (n − 1) قد وجد على غرار ذلك انها تساوي $-\alpha(U_{n-1} - U_n)$ ، وبتطبيق قانون نيوتن الثاني (F = ma) على حركة الذرة n فأن .

$$m \frac{d_2U_n}{dt^2} = -\alpha(U_{n+1} - U_n) - \alpha(U_{n-1} - U_n)$$

$$= \alpha(2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}) \qquad \dots (4\text{-}2)$$

من المعادلة (4-2) .اقتصرت عملية تفاعل ذرة n مع اقرب جارتيها n +1 , n -1 فقط وذلك لتوضيح الفكرة الفيزياوية بدون الخوض في التعقيدات الرياضية ولكن ذلك غير الحقيقة اذ ان حركة الذرات مرتبطة مع بعضها على طول الجسم الصلب بحل معادلة (4-2) يمكن ان تمثل حركة الاهتزاز بالشكل التالي

$$U_n = U_0 e^{i(qX_n - wt)} \qquad \dots (4\text{-}3)$$

حيث X_n موقع استقرار ذرة n, ($X_n = na$) المعادلة (4-3) تمثل موجة متنقلة تتذبذب فيها جميع الذرات بنفس التردد الزاوي (w) وذات سعة عظمى U_0 وعدد موجي (q) كما هو متوقع ، وفي هذه الحركة تكون اطوار تذبذب الذرات منتظمة بحيث ان فرق الطور بين ذرة والذرة التي تليها يساوي X_n .وباستخدام معادلة (4-3) لحل معادلة (4-2) يكون ممكناً فقط عند وجود التناظر الانتقالي في الشبيكة .

بأخذ التفاضل الثاني لمعادلة (4-3) وتعويضه في معادلة (4-2) يمكن الحصول على

$$mw^2U_n = \alpha(2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}) \qquad \dots (4\text{-}4)$$

بتقسيم طرفي المعادلة (4-4) على mU_n نحصل على

$$w^2 = \frac{\alpha}{m}\left(2 - \frac{U_{n+1}}{U_n} - \frac{U_{n-1}}{U_n}\right) \qquad \dots (4\text{-}5)$$

ولكن

$$U_{n+1} = U_0 e^{i[q(n+1)a - wt]} \qquad \dots (4\text{-}6)$$

و

$$U_{n-1} = U_0 e^{i[q(n-1)a - wt]} \qquad \dots (4\text{-}7)$$

وبتعويض قيمة U_{n-1}, U_{n+1} يمكن الحصول على

$$w^2 = \frac{\alpha}{m} \left(2 - 2 \left(\frac{e^{iqa} + e^{-iqa}}{2} \right) \right] \qquad \ldots (4\text{-}8)$$

$$w^2 = 4 \frac{\alpha}{m} \operatorname{Sin}^2 \frac{qa}{2} \qquad \ldots (4\text{-}9)$$

أو

$$w = w_m \operatorname{Sin} \left(\frac{qa}{2} \right) \qquad \ldots (4\text{-}10)$$

هده هي علاقة التفريق (dispersion relation) بين q , w في شبيكة ذات نوع واحد من الذرات وفي بعد واحد .ويكون $w_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}$

وان قيم w_m اقتصرت على القيم الموجبة فقط بسبب المعنى الفيزياوي للتردد . ويبدو ان منحني التفريق جيبياً وبدورية مقدارها $\frac{\pi}{a}$ في فضاء q وبأقصى تردد يساوي w_m عند $\frac{2\pi}{a}$. وتمتلك هذه العلاقة خواصاً مهمة كثيرة والتي سناتي الان الى دراستها بالتفصيل. هذه العلاقة تنطبق على شبيكة احادية البعد وكذلك ثنائية وثلاثية الابعاد ايضاً .

1 - 2 - 4 - حدود الموجات الطويلة

وبما ان منحني التفريق دوري ومتناظر حول نقطة الاصل فنركز اهتمامنا في الوقت الحاضر على المدى $0 < q < \frac{\pi}{a}$ ونرى ان التردد يقع ضمن المدى $0 < w < w_m$ ، هذه الترددات سوف تنقل من قبل الشبيكة . بينما الترددات الاخرى سوف توهن وتتلاشى بسرعة وبذلك تعمل الشبيكة كمرشح ميكانيكي للترددات الواطئة . وفي حدود الموجات الطويلة اي عندما $q \to 0$ يمكن تقريب $\operatorname{Sin} \frac{qa}{2} \to \frac{qa}{2}$ وبذلك

$$w = \frac{w_m a}{2} q \qquad \ldots (4\text{-}11)$$

$$w = v_s q \qquad \left(v_s = \frac{w_m a}{2} \right)$$

حيث v_s ثابت التناسب وتساوي سرعة الصوت

وهذه العلاقة خطية بين q ، w . ضمن هذه الحدود من الترددات الشبيكة تسلك كوسطٍ مستمر (Continoum) ومرن .

يمكننا استخدام المعادلة (4-11) للربط بين ثابت القوة الداخلية (α) بين الذرات ومعامل يونك (Y) (Young's modulus) للمرونة .

$$v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \qquad \dots (4\text{-}12)$$

حيث Y معامل يونك و ρ كثافة الوسط . ومن المعادلتين (4-11) و (4-12) نحصل على

$$\left(\frac{Y}{\rho} \right)^{1/2} = \frac{w_m a}{2} \qquad \dots (4\text{-}13)$$

وبالتعويض عن $\rho = \frac{m}{a^3}$, $w_m = \left(\frac{4\alpha}{m} \right)$ من المعادلة (4-13) نحصل على

$$\alpha = a\,Y \qquad \dots (4\text{-}14)$$

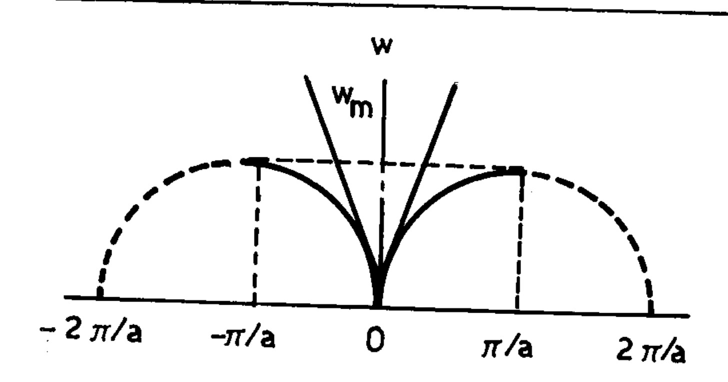
ومن الممكن الحصول على القيمة العددية لـ α من هذه المعادلة عند تعويض القيم النموذجية لـ Y ، a اذا علمت ان $Y = 10^{11}$ dynes / cm^2 , $a = 5 \times 10^{-8}$ cm

2 - 2 - 4 حدود الموجات الطويلة

عند ازدياد قيمة q فان منحني التفريق يبدأ يميل عن الخط المستقيم وينحني نحو الاسفل كما في الشكل (2-4) . واخيراً يصل المنحني القيمة العظمى عند $q = \frac{\pi}{a}$ حيث يكون التردد حينئذٍ اعلى مايمكن (w_m) والذي يمكن ايجاد قيمته العددية من العلاقة $w_m = \left(\frac{4\alpha}{m} \right)^{1/2}$

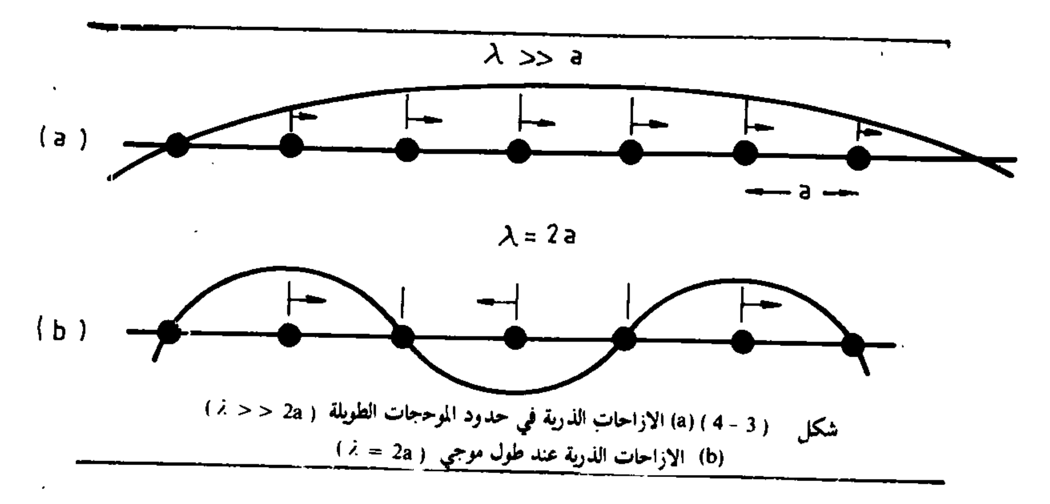
نلاحظ ان التردد w_m يعتمد على ثابت القوة بين الذرات α وكتلة الذرة المهتزة وكما هو متوقع لاي نظام متذبذب تذبذباً توافقياً بسيطاً . ويمكن ايجاد قيمة التردد

القصوى w_m بتعويض القيمة العددية $\alpha = 5 \times 10^3$ dyne / cm والـكتلة m $(m = 2 \times 10^{-24} g)$ لذرة الهايدروجين مثلاً نجد ان $w_m = 10^{13} s^{-1}$ والتي تقع في حدود منطقة الترددات تحت الحمراء



الشكل (2 - 4) علاقة التفريق لشبكة احادية الذرات وفي بعد واحد

يمكننا فهم سلوك منحني التفريق ضمن المدى $0 < q < \frac{\pi}{a}$ من خلال المناقشة التالية : عندما يكون العدد الموجي (q) صغيراً اي $\lambda >> a$ فـان الذرات تتحرك باتجاه واحد وبنفس الطوركما هومبين في الشكل (4-3a) . فـي الحالة تكون القوة المعيدة المؤثرة على الذرات بسبب جاراتها صغيرة وهذا هوسبب كون w صغيرة ايضاً .



شكل (3 - 4) (a) الازاحات الذرية في حدود الموجات الطويلة ($\lambda >> 2a$)
(b) الازاحات الذرية عند طول موجي ($\lambda = 2a$)

عندما تقترب قيمة (q) من الصفر فان الطول الموجي (λ) يقترب من اللانهاية وهذا يعني ان الشبكية البلورية تتحرك كلها كجسم هلامي والتي تؤدي الى تلاشي القوة المعيدة . هذا يفسركون $w = 0$ عندما $q = 0$. ولكن عندما $q = \pi / a$ ، اي $\lambda = 2a$ (الشكل 4-3b) فمن الممكن ان تلاحظ بأن الذرات المتجاورة تتحرك ونتيجة لذلك تكون القوة المعيدة والتردد اعلى مايمكن في هذه الحالة .

3 - 2 - 4 سرعة الطور وسرعة مجموعة الامواج

في النظرية الموجبة هناك نوعان من السرعة هما سرعة الطور (phase velocity) وسرعة المجموعة (group velocity) . لعلاقة التفريق الاعتباطية فان سرعة الطور تتضح بالعلاقة (4-15) $v_{ph} = \frac{w}{q}$ حيث v_{ph} سرعة الطور وسرعة المجموعة تأخذ العلاقة التالية

$$v_g = \frac{\partial w}{\partial q} \qquad \dots (4\text{-}16)$$

حيث v_g سرعة المجموعة

ان التمييز الفيزيائي بين هذين السرعتين هو ان v_{ph} سرعة انتشار موجة نقية ذات تردد معين (w) ومتجه موجي (q) بينما سرعة المجموعة تمثل سرعة النبضة (Pulse) والتي متوسط ترددها w ومتجه الموجة ($\vec{q}$) وبما ان الطاقة والزخم تنقل عملياً بواسطة النبضات وليس الموجات النقية لذا فان سرعة المجموعة هي الأكثر أهمية فيزياوياً .

والآن نحاول ان نناقش سلوك سرعة الطور v_{ph} وسرعة المجموعة v_g للشبكية في حدود الموجات الطويلة والتي يكون فيها $w = v_s q$ ولذا فان

$$\frac{w}{q} = \frac{dw}{dq} = v_s = v_{ph} \qquad \dots (4\text{-}17)$$

وتبقى سرعة المجموعة v_g وسرعة الطور v_{ph} متساويتين وهذه النتيجة متوقعة لان الموجات الطويلة مقاربة للمسافة البينية للذرات ولاتتأثر بعدم الترابط في الوسط .

حيث يساهم عدد كبير من الذرات في جميع الازاحات الموجية كما هو الحال دائماً في وسط مستمر لاحظ الشكل (4-3a)

مع ازدياد التردد فان سرعة الطور وسرعة المجموعة تختلفان عن بعضهما ، حيث تكون : -

$$v_g = \frac{dw}{dq} = v_{ph} \cos \frac{qa}{2} \quad \dots (4\text{-}18)$$

جدير بالملاحظة فانه كلما تقترب (q) من الصفر أو $\left(\frac{\pi}{a}\right)$ فان v_g تقترب من الصفر .

اما بالنسبة لسرعة الطور

$$v_{ph} = \frac{w}{q} = \frac{2v_s}{qa} \sin \frac{qa}{2} \quad \dots (4\text{-}19)$$

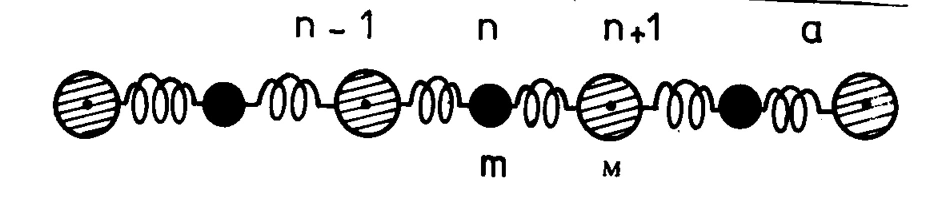
فعندما تقترب q من الصفر فان سرعة الطور v_{ph} تقرب من سرعة الصوت

اما عندما تقترب (q) من $\left(\frac{\pi}{a}\right)$ فان v_{ph} تقترب من $\left(\frac{2v_s}{2}\right)$

وبما ان سرعة المجموعة تمثل انتقال النبضات او الطاقة لذا تكون $v_g = 0$ عند $q = \frac{\pi}{a}$ تعني عدم حدوث انتقال الطاقة في هذه الحالة . وهذه تناظر انعكاس براك عند حيود الاشعة السينية (لاحظ الشكل 4-4b) اي ان التردد $w \leq \frac{2v_s}{a}$ ينتشر في وسط مستمر ، ولكن نجد ان اطوال موجية اقصر من (2a) لاتنتشر في وسط مستمر .

4 - 3 اهتزاز الشبيكة ثنائية الذرة في بعد واحد

والآن لنحاول دراسة شبيكة ثنائية الذرة في بعد واحد ، لان اهتزاز هذا النوع من الشبيكة له مميزات مهمة والشكل (4-4) يبين شبيكة ثنائية الذرة ، حيث تحتوي وحدة الخلية على ذرتين كتلتهما M , m (حيث M > m) والمسافة بينهما a ومثال على ذلك بلورة كلوريد الصوديوم والكتلتان المختلفتان هما كتلتا ذرتي الصوديوم والكلور .



الشكل 4 - 4 شبيكة ثنائية الذرة في بعد واحد

ان حركة هذه الشبيكة يمكن معاملتها بطريقة مماثلة الى حركة لشبيكة احادية الذرة . وبما ان هناك نوعين مختلفين من الذرات ، سوف نكتب معادلتين للحركة ، بالمناظرة نحصل على

$$m \frac{d_2 U_{n+1}}{dt^2} = -\alpha(2U_{n+1} - U_{2n} - U_{2n+2}) \quad \dots (4\text{-}20)$$

$$M \frac{d^2 U_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2U_{2n+2} - U_{2n+1} - U_{2n+3}) \quad \dots (4\text{-}21)$$

حيث n هو عدد صحيح يشير الى مواقع الذرات .
بحيث ان جميع الذرات التي كتلتها m اشير لها بالاعداد الفردية وتلك التي كتلتها M بالاعداد الزوجية . ولنفترض ان حل المعادلتين (4-20) ، (4-21) يأخذ الصيغة التالية

$$\begin{aligned} U_{2n} &= A e^{i(q2na - wt)} \\ U_{2n+1} &= B e^{i[q(2n+1)a - wt]} \\ U_{2n+3} &= A e^{i[q(2n+3)a - wt]} \end{aligned} \quad \dots (4\text{-}22)$$

والآن اذا عوضنا 4-22 في المعادلة (4-20) . وبتبسيط المعادلة يمكن الحصول على المصفوفة التالية :

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - mw^2 & -2\alpha\cos(qa) \\ -2\alpha\cos(qa) & 2\alpha - Mw^2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} A \\ B \end{vmatrix} = 0 \quad \dots (4\text{-}23)$$

وهذه هي معادلة مصفوفة مكافئة الى معادلتين من المعادلات الآنية لمجاهيل B ، A وبما ان المعادلتين هما آنيتان يكون حلهما صحيحاً فقط اذا كانت محددودة المصفوفة تساوي صفراً . اي

$$\begin{vmatrix} 2\alpha\, mw^2 - 2\alpha & \cos(qa) \\ -2\alpha\cos(qa) & 2\alpha - Mw^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \dots (4\text{-}24)$$

وهذه هي معادلة من الدرجة الثانية لـ w^2 ، والتي يمكن حلها بسهولة وبالشكل التالي

$$w^2 = \alpha\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \mp \alpha\sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(qa)}{mM}} \quad \dots (4\text{-}25)$$

وهذه هي علاقة التفريق للشبيكة ذات النوعين من الذرات وفي بعد واحد .
ان المعادلة 4.25 لها حلان ولكي نناقش حل هذه المعادلة لناخذ حالتين .

الحالة الاولى ، عندما يقترب (q) من الصفر فان المعادلة (4-25) تصبح

$$w^2 = \alpha\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \mp \alpha\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) \quad \dots (4\text{-}26)$$

باخذ الاشارة السالبة نحصل

$$w_1^- = 0 \quad \dots (4\text{-}27)$$

وعندما ناخذ الاشارة الموجبة ، فان

$$w_2^{+2} = 2\alpha\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$$

$$w_2^+ = \sqrt{2\alpha\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)} \quad \dots (4\text{-}28)$$

اما الحالة الثانية عندما يكون $q = \frac{n\pi}{2a}$
حيث (n) اعداد فردية وتساوي $n = 1, 3, 5 + \dots$ وبذلك فان الحد الذي حتوي على (sin qa) في المعادلة (4-25) يصبح $\left(-\frac{4}{Mm}\right)$ او

$$w^2 = \alpha\left[\frac{m + M}{mM} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{Mm}}\right. \quad \dots (4\text{-}29)$$

أو

$$w^2 = \alpha \left[\frac{m + M}{mM} \pm \frac{M - m}{mM} \right]$$

باخذ الاشارة السالبة

$$w_3^- = \alpha \left[\frac{M + m}{mM} - \frac{M - m}{Mm} \right]$$

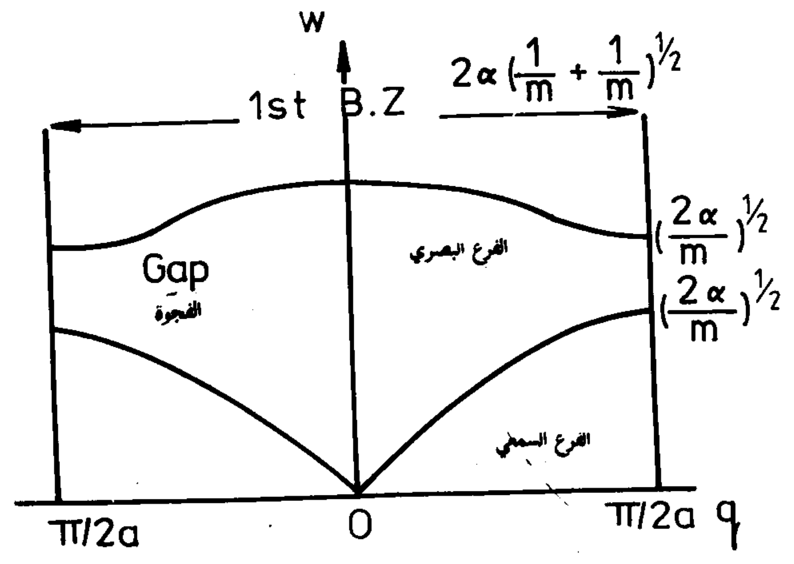
أو

$$w_3^- = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}} \qquad \dots (4\text{–}30)$$

وباخذ الاشارة الموجبة ، نحصل على

$$w_4^+ = \sqrt{\frac{2\alpha}{m}} \qquad \dots (4\text{–}31)$$

ان نتائج المعادلات (4–27) , (4–28) , (4–30) , (4–31) مبين في الشكل (5 –4) فان الترددات المسموحة للانتشار تنشطر الى فرعين . حيث المنحني الاسفل يتضمن الاشارة السالبة وهو الفرع السمعي acoustical branch ، بينما المنحني



الشكل (5 4) الفرع البصري والسمعي لعلاقة التفريق لشبيكة خطية ذات ذرتين مختلفتين (M – m)

الاعلى هو الفرع البصري (optical branch) . ان الفرع السمعي يبدأ عند النقطة $w = 0, q = 0$. وكلما زادت q فان w تزداد خطياً في البداية ، ولـكن بعد ذلك يقل معدل تغير w ويصبح اعلى قيمة لها عند $q = \frac{\pi}{2a}$ اي التـــردد $\left(\frac{2\alpha}{M}\right)^{1/2}$ وكذلك بالنسبة للفرع البصري ، فهو يبدا عند $q = 0$ باقصى تردد

$$w_m = \left[2\alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \right]^{1/2}$$

ثم ينخفض ببطء ويتشبع عند $q = \frac{\pi}{2a}$ بتردد $\left(\frac{2\alpha}{m}\right)^{1/2}$. ان تردد هذا الفرع كما مبين من الشكل (5-4) لايتغير بصورة كبيرة مع تغيير q وغالبا يعتبر (q) ثابت تقريباً

اما مدى التردد بين قمة الفرع السمعي وأوطأ نقطة في الفرع البصري فهوتردد ممنوع ويعرف بـ الفجوة المحظورة (forbidden band) وعرض هذه الفجوة تعتمد على اختلاف كتلتي الذرتين . اما اذا تساوت الـكتلتان فان الفرعين يتطابقان عند $q = \frac{\pi}{2a}$ ومن الجدير بالملاحظة ان منطقة بريليون (Brillouin zone) الاولى تمتد مـــن $\left(-\frac{\pi}{2a}\right)$ و $\left(\frac{\pi}{2a}\right)$ مقارنة بشبيكة احادية الذرة حيث تمتد منطقة بريليون الاولى من $+\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}$

والآن لنسأل ماهي الفروقات الاساسية بين الفرع البصري والفرع السمعي . ولماذا سميا بذلك ؟

ان الفرق المميز بين الفرع السمعي والبصري يمكن ان يلاحظ بصورة واضحة عند $q = 0$ حيث من الممكن استخدام المعادلة (23 - 4) لايجاد النسبة A/B .

$$A\,(2\alpha \cos qa) + B\,(\omega^2 M - 2\alpha) = 0$$

وبالتعويض عن $w = 0$ (عندما تكون $q = 0$ يكون $w = 0$) للفرع السمعي نجد ان المعادلة تحقق فقط عندما $A = B$ وهذا يعني ان الذرتين في هذا الفرع تمتلـكان سعة التذبذب نفسها وكذلك الطور نفسه اوبعبارة اخرى ان الشبيكة تتحرك كجسم هلامي حيث يتحرك مركز الثقل بالاتجاه الامامي والخلفي كما في الشكل (6 - 4)

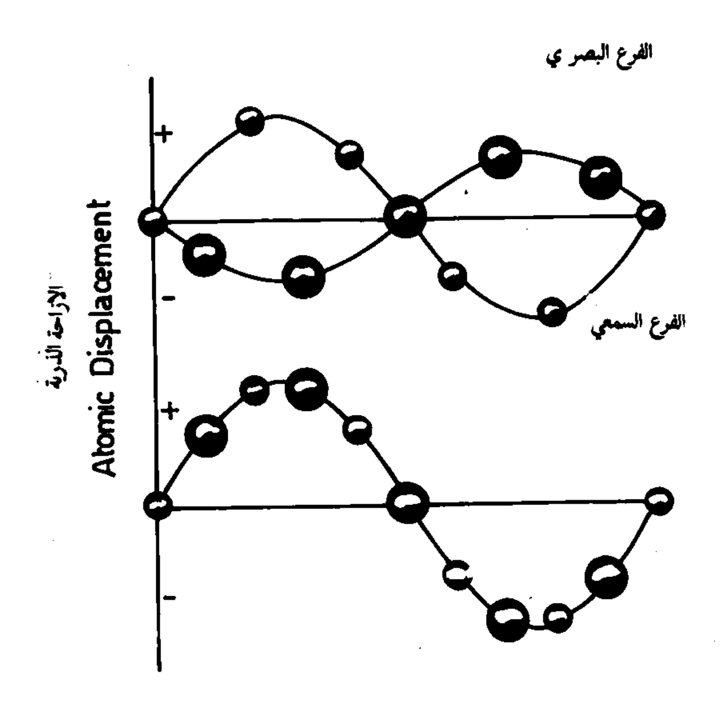
وبازدياد قيمة q فان سعة التذبذب للذرتين لاتبقى متساوية تماماً ولـكنهما يتحركان بالطور نفسه تقريباً . لايجاد النسبة بين B , A للفرع البصري وذلك بالتعويض عن

$$\omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

في المعادلة (23 – 4) نجد ان

$$\frac{A}{B} = - \frac{m}{M} \qquad \dots (4 - 33)$$

وهذا يعني ان التذبذب البصري يحدث بشكل بحيث ان مركز كتلة الخلية يبقى ثابتاً بينما تتحرك الذرات بفارق الطور π فيما بينها وكما هو موضح في الشكل (6 – 4).



الشكل (6 – 4)الازاحات الذرية في الفرع البصري($a \sim \lambda$)والفرع السمعي $\infty \to \lambda$ لشبيكة ثنائية الذرة ذات بعد واحد

وبزيادة q نجد ان تردد (اهتزاز) الذرات ينقص ولكن هذا النقصان ليس كبيراً لان الذرات تستمر بالاهتزاز بفارق الطور π تقريباً مع بعضها خلال جميع مدى تغير q .

ان سبب تسمية الفرع الاعلى بالبصري (الشكل (5 – 4) هو ان تردد هذا الفرع يتضح بالعلاقة $\omega_4^+ = \sqrt{\frac{2\alpha}{m}}$ وباستخدام القيم الحقيقية لـ α و m نجد ان هذا التردد بحدود 10^{13} هرتز وهذا التردد يقع في المنطقة تحت الحمراء . اما سبب تسمية الفرع السمعي بهذا الاسم فيرجع الى العلاقة الخطية بين q,ω (المعادلة (11 – 4) في الترددات الواطئة ، حيث ثابت التناسب هو سرعة الصوت .

4 – 4 مراجعة في الميكانيك الاحصائي

ان نمط اهتزاز الذرات في البلورة معقد جداً وحساب الطاقة الكلية للبلورة بجمع طاقة كل ذرة على انفراد غير ممكن . ، اذا افترضنا ان النظام (البلورة) في حالة التوازن الحراري اي جميع ذراتها لها درجة حرارية متساوية فحينئذ من الممكن تطبيق بعض قوانين الميكانيك الاحصائي لحساب الاحتمالية النسبية (Relative probability) للجسيمة المهتزة في النظام او بعبارة اخرى ايجاد عدد الجسيمات التي من المحتمل ان تكون عند طاقة $\in_1 , \in_2$ وهكذا .

ان دالة الاحتمالية $F_{(\in)}$(probability function) والتي تدل عادة على احصائيات النظام ، تنقسم الى ثلاثة انواع من الدوال الاحتمالية على اساس نوع النظام المطبق عليه والجسيمات المكونة منها . ونراجع هنا باختصار الدوال الثلاثة دون اشتقاق هذه الدوال . يمكن ايجاد طرق اشتقاق هذه الدوال في اي كتاب (ميكانيك احصائي) وكذلك نناقش بعض خصائص هذه الدوال لاهمية استخداماتها في مواضيع مختلفة من الفصول القادمة .

ان جميع الانظمة الجسيمية التي تطبق عليها هذه القوانين الاحصائية تفترض عدم وجود اي تفاعل بين جسيمة وجاراتها اي ان حالة الطاقة (Energy state) لاي جسيمة لاتتأثر بحالة الطاقة لجاراتها . وبصورة عامة يمكن تقسيم الانظمة الجسيمية ، على اساس تركيبها الجسيمي الى نوعين وهما : – انظمة تحتوي على جسيمات متميزة (distingushable) وانظمة تحتوي على جسيمات غير متميزة

(indistingushable) . والقصد بالتميز هنا هو ان كل ذرة يمكن ان تعين بواسطة المحاور الدالة على موقع الذرة

اما الـكترونات داخل المعدن عادة يعبر عنها بالموجات المتراصة (wave packet) والتي تمتد الى الفضاء المحيط وتتداخل مع موجة لجسيمة اخرى وهذه التداخل يجعل من الصعب التمييز بين جسمين ولذا تعتبر الالـكترونات جسيمات غيـــر متميـــزة .

ان الانظمة التي تتكون من جسيمات متميزة تتبع قانون ماكسويل بولتزمان للاحصاء أي :

$$F_{M \cdot B} = A \exp (- \varepsilon / K_B T) \qquad \ldots (4-34)$$

اما الجسيمات الغيرمتميزة فتنقسم الى نوعين . الجسيمات التي لها برم $\frac{1}{2}$ h (spin) (مثل الالـكترونات – البروتونات ..) وتخضع لمبدأ الانفراد لباولي ان هذه الجسيمات تخضع لقانون فيرمي – للاحصاء اي ان

$$f_{f \cdot D} = \frac{1}{\exp \{ (\varepsilon - \varepsilon_f) / K_B T \} + 1} \qquad \ldots (4-35)$$

حيث ε_F طاقةفيرمي . وتلعب هذه الدالة دوراً مهماً في نظرية الالكترونات الحرة . Free electron theory في المعادن والتي ستأتي الى شرحها في الفصل الخامس .

اما الجسيمات التي ليس لها برم $(S = 0)$مثل (الفوتونات والفونونات) فتتبع . قانون بوز – أينشتاين للاحصاء أي :

$$F_{B \cdot E} = \frac{1}{\exp \{ (\varepsilon_f - \alpha) / K_B T \} - 1} \qquad \ldots (4-36)$$

وجدير بالملاحظة أنه عند امتلاك الجسم لطاقة عالية فأن كل من قانون فرمي ديراك – وبوز – أينشتاين يقتربان من قانون ماكسويل – بولتزمان الكلاسيكي . وتستخدم عادة هذا التقريب لتبسيط عمليات الحساسية الخاصة لهذه الاحصائيات .

اما الثوابت A, ε_f, αالمذكور في المعادلات اعلاه على التوالي فيها ثوابت التعبير . (normalizing parameter) وتحسب قيمة كل منها بحيث تكون قيمة احتمالية حالات الطاقة المسموحة للجسمية خلال النظام مساوية لواحد .

5 ـ 4 الفونونات

يمكن معالجة الاهتزازات الشبيكة التي تم ذكرها سابقاً بطريقة تختلف عن ذلك قليلاً حيث يمكن اعتبار الشبيكة البلورية متكونة من نظام جسمي كبير وبأمكانه أن ينبض بترددات مختلفة مثل حركة قطعة من الهلام (Jelly) . وقد افترضنا سابقاً أن هده الترددات تتولد من متذبذبات مستقلة ولكن النظام الجسيمي ككل يولد أيضاً الترددات الخاصة به دون الحاجة الى أي تأثير خارجي . وبما أن المتذبذبات تتفاعل نرى من الضروري أن نعبر عن الاهتزازات هذا النظام بأنمـــاط مختلفـة . (Various modes) ضمن نظام معقد من الاهتزازات . ولكن يجب ان نطبق على هذا النظام قوانين ميكانيك الكم حيث ان طاقة النظام تزداد بكميات متقطعة من الطاقة تساوي $h\omega$. وهذا الكم من الاهتزاز يتضمن ازاحات لجميع الذرات المتذبذبة بدلاً من ازاحة للذرة الواحدة . بالمقارنة مع الفوتون (كم الطاقة الضوئية) نجد ان طاقة الاهتزاز تتضح بالعلاقة $\xi = h\Omega$ حيث Ω تردد الفونونات وهذا الكم من طاقة الاهتزات يدعى بالفونون (Phonon) . وبما ان فونون هو موجة متنقلة فهو يحمل زخمه الخاص به وبالمقارنة مع الفوتون فان زخم الفونون يتضح بالعلاقة $p = \frac{h}{\lambda}$. حيث λ هي الطول الموجي . وبكتابة $\Omega = \frac{2\pi}{q}$ حيث q عدد موجي فيكون زخم الفونون $p = hq$. كما نتصور ان الموجات الكهرومغناطيسية هي سيل مـــن الفوتونات . فنحن الان نرى ان الموجات الصوتية هي سيل من الفونونات التي تحمل طاقة وزخم الموجة . وان سرعة انتقال الفونون تساوي سرعة الصوت في الوسط .

بما ان الفونونات هي جسيمات غير متميزة لذا تتبع قانون بوز – اينشتاين 4 - 36 وان معدل عدد الفونونات في النمط عند التوازن الحراري يمكن ايجاده من العلاقة :

$$< n > = \frac{1}{\exp \{ (h\omega / K_B T) - 1 \}} \qquad \dots (4 - 37)$$

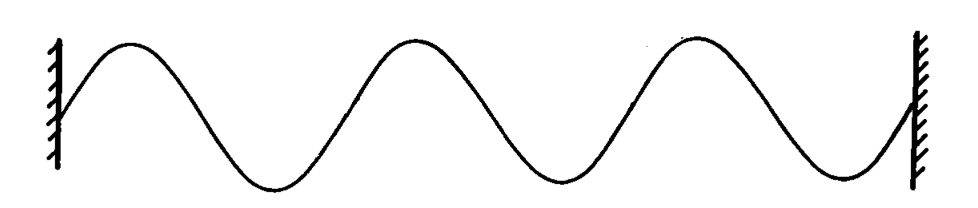
ان عدد الفونونات يعتمد على درجة الحرارة حيث عند $T = 0$ فان $< n > = 0$ ولكن كلما زادت T تزداد $< n >$ حيث $< n > = K_B T // h$ عند درجات الحرارة العالية . والجدير بالملاحظة هو ان الفونونات تتولد ببساطة وذلك برفع درجة الحرارة وهكذا يكون عددها في النظام غير محفوظ notconserved . ان فكرة الفونون وتفاعله مع اشكال الطاقة الاخرى كالاشعة السينية والنيوترونات والضوء يمثل حقلاً مهماً في دراسة فيزياء الحالة الصلبة .

6 - 4 كثافة الحالات في الوسط المستمر

لـو افترضنا خطاً شبيكياً طوله كما في الشكل (7-4) ومثبت . من طرفيه : يمكن أن نعبر عن الحركة الموجية لهذا الخط بالعلاقة التاليـة .



$$U = U_0 e^{iqx} \qquad \ldots (4-38)$$



شكل (4.7) حركة الموجات في خط شبيكي مثبت من الطرفين .

وقد حذف الحد الزمني نظراً لعدم أهميته في الموضوع الحالي . ولحل المعادلة 38 - 4. الشرط الحدودي نستخدم (boundarycondition) ويحدد عادة بنوع الاضطراب الخارجي المسلط على نهايتين الخط. فمثلاً عندما يتذبذب الجزء الداخلي للخط فقد تكون النهايتان متحركتين أو ثابتتين. أن الشروط الحدودية التي تستخدمها هنا هي الشروط الحدودية الدورية ونقصد بذلك أن نهايتين الخط مثبتة بحيث تكونا دائماً في الوضع نفسه ويكون بذلك الخط وكانه تحول الى شكل دائري بحيث ترتبط النهاية اليمنى باليسرى كما في الشكل (4.8) .فأذا علمنا بأن طول الخط هو L فأن الصيغة الرياضية للشروط الحدودية تكون

$$U(x) = U(x + L) \qquad \ldots (4-39)$$

حيث (L) عدد صحيح للاطوال الموجية في الدائرة .Uهي حل للمعادلة (38 - 3) . واذا أخذنا أي نقطة اعتباطية على الدائرة كنقطة الاصل فسيكون لدينا .

$$U(x + L) = U_0 e^{iq(x+L)} = U_0 e^{qx} . e^{iqL} \qquad \ldots (4-40)$$

ولكن $U(x) = U(x + L)$

وعليه $U_0 e^{iqx} = U_0 e^{iqx} . e^{iqL}$

وبذلك $e^{iqL} = 1$

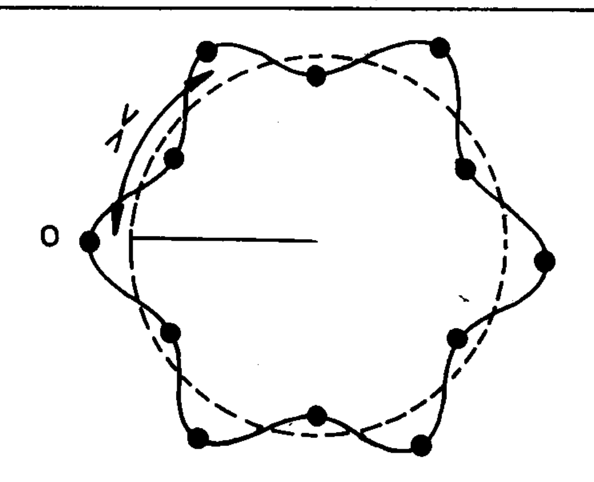
ويكون هذا صحيحاً اذا $qL = 2\pi n$

أو

$$q = \frac{2\pi n}{L} \qquad \ldots (4-41)$$

حيث تكون القيمة المسموحة لـ n في معادلة (41-4) هـــي :

(n=0,∓1,∓ 2 ...) . عندما ترسم هذه القيم على محور q تكون شبيكة ذات نقاط متساوية البعد . وكلما يكون طول الخط كبير (المعادلة 4 - 4) يصبح مقدار التباعد صغيراً وبذلك يمكن اعتبار النقاط شبه متصلة



الشكل (8 - 4) الشرط الحدودي الدوراني لخط الشبيكة

أن كل نقطة في الشكل (9-4) تمثل نمطاً للاهتزاز . ولأن نحاول أن نجد عدد الأنماط المحصورة بين q , q + dq نفرض ان تكون كبيرة بحيث ان النقاط شبه متصلة وهذا يكون صحيحاً بالطبع للاجسام الجاهرية (macroscopic) التي نتعامل نحن معها وبما أن المسافة بين النقاط هي $\frac{2\pi}{L}$ فان عدد الانماط هو :

$$\frac{L}{2\pi} dq \qquad \ldots (4-42)$$

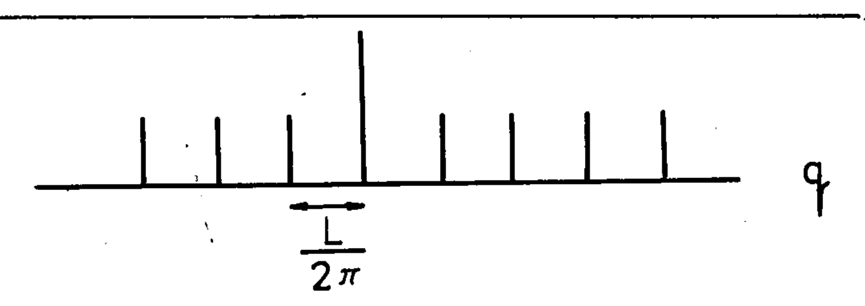
من الممكن بسهولة ايجاد عدد الانماط الواقعة بين ω , ω + dω تعرف كثافة الحالات g (ω) (density of states) بالعلاقة التاليـة :

$$g(\omega)\, d\omega = \frac{L}{2\pi} dq \qquad \ldots (4-43)$$

أو



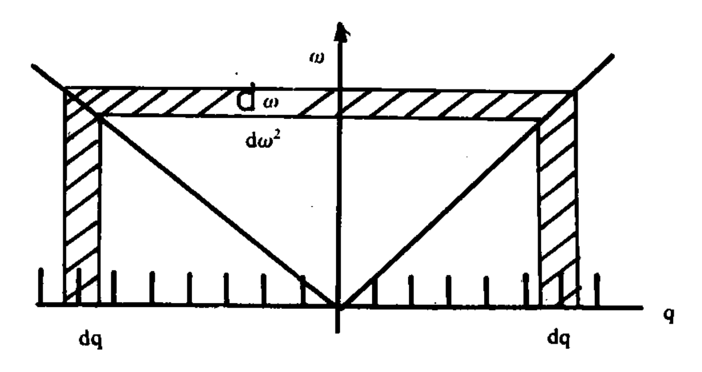
$$g(\omega) = \frac{L}{2\pi} \frac{dq}{d\omega} \qquad \ldots (4-44)$$



الشكل (9 - 4) القيم المسموحة لـ q في الشبيكة الخطية

ونلاحظ من الشكل (10 - 4) أن عند حساب $g(\omega)$ يجب تضمين الانماط الواقعة في منطقة السالبة وكذلك الموجبة . حيث الاولى تمثل الموجات المتحركة نحو اليسار والثانية تمثل الموجات المتحركة نحو اليمن وهذا يعني ضرب العلاقة (44 - 4) بعامل مقداره 2 ، أي أن

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \cdot \frac{1}{\frac{d\omega}{dq}} \qquad \ldots (4-45)$$



الشكل (10-4) علاقة التفريق تحتوي على الانماط الواقعة في منطقة q السالبة والموجبة

وهذه نتيجة عامة لكثافة الحالات لبعد واحد وتحت الشروط الحدودية ذات النهايتين المثبتين .

نلاحظ أن الكثافة الحالات $g(\omega)$ تتحدد بعلاقة التفريق (45 - 4) وبذلك

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \cdot \frac{1}{v_s} \qquad \dots (4-46)$$

وهذه تكون ثابتة ولاتعتمد على ω .

والان نجد كثافة الحالات بثلاثة أبعاد . أن حل معادلة (47 - 4) بالمقارنة مع المعادلة (38 - 4) هـي :

$$U = U_0\, e^{i(q_x x + q_y y + q_z z)} = U_0\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \qquad \dots (4-47)$$

حيث q تمثل اتجاه انتشار الموجة وقيمته يتناسب مع مقلوب الطول الموجي .مرة اخرى نطبق الشروط الحدودية الدورية . ولغرض التبسيط نأخذ نموذج مكعب ابعاده L وبأستخدام الشروط الحدودية الدورية فان القيم المسموحة(q) يجب ان نحقق الشرط :

$$e^{i(q_x L + q_y L + q_z L)} = 1 \qquad \dots (4-48)$$

أي أن القيم تمثل بالعلاقة :

$$q_x , q_y , q_z = \left(n\,\frac{2\pi}{L} , m\,\frac{2\pi}{L} , l\,\frac{2\pi}{L} \right) \qquad \dots (4-49)$$

حيث أن l, m, n ثلاثة اعداد صحيحة

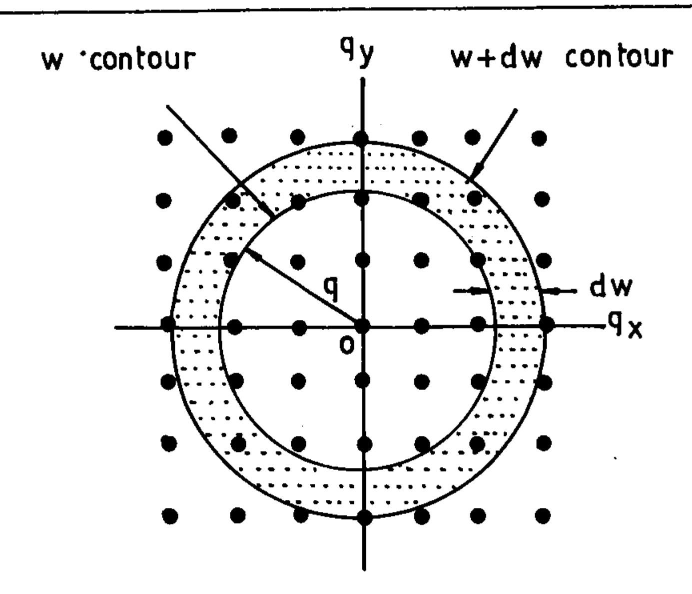
اذا رسمنا هذه القيم في فضاء q ، كما في الشكل (11 - 4) نحصل على شبيكة ذات ثلاثة أبعاد . وأن كل نقطة من هذه الشبيكة تمثل نمطاً في التذبذب وأن كل نقطة تشغل حجماً هو $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$. وبما أن حجم النقطة الواحدة هو $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ لذا فأن عدد الانماط الكلية داخل كرة ذات نصف قطر q هـو :

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \cdot \frac{4\pi}{3} q^3 = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} q^3 \qquad \dots (4-50)$$

حيث $V=L^3$ وهذا هو حجم المكعب . وتشمل هذه المعادلة جميع الموجات . وتكون q لها أقل من قيمة معينة وتتنقل الى جميع الاتجاهات . وبتفاضل المعادلة (50 - 4 بالنسبة الى q نحصل على :

$$\frac{v}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi q^2 dq \quad \dots (4-51)$$

وهي بذلك تعطي عدد الانماط في القشرة الكروية المحصورة بين q , q + dq وكما في الشكل (11 - 4) .



الشكل 11 - 4) القيم المسموحة لـ q للموجة تنتقل في ثلاثة ابعاد . القشرة الدائرية المظللة تستخدم لحساب عدد الانماط

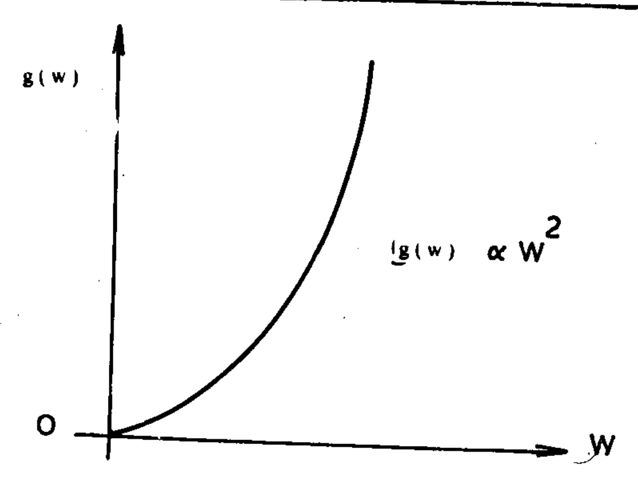
ان كثافة الحالات قد عرفت بحيث ان $g(\omega)\,d\omega$ تمثل عدد الأنماط التي ترددها يقع بين ω , $\omega + d\omega$ وهذا العدد يمكن أن نحصل عليه بتحويل المتغير من q الى ω والذي يمكن أن يتم بأستخدام علاقة الانتشار $\omega = V_s q$ ويمكن الحصول على

$$g(\omega)\,d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \left(\frac{\omega}{V_s} \right)^2 \cdot \frac{d\omega}{V_s} \quad \dots (4-52)$$

أن هذه العلاقة تعطي عدد النقاط بين سطح ذي تردد ثابت ω وأخر مماثل ذي تردد $\omega + d\omega$ في فضاء q وتكون هذه السطوح كروية ، والحجم بينهما هو القشرة الكروية المبينة في الشكل 11 - 4 وتمثل العلاقة (52 - 4) عدد النقاط في داخل القشرة طبقاً للمعادلة أعلاه فأن كثافة الحالات $g(\omega)$ تتضح بما يلي :

$$g(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{V_s^3} \quad \ldots (4-53)$$

ان الشكل 12 - 4 يبين رسم هذه الدالة مع ω حيث يلاحظ بان $g(\omega)$ تزداد مع ω^2 خلافاً للحالة $g(\omega)$ في بعد واحد حينما تكون فيها $g(\omega)$ ثابتة . ان الزيادة في هذه الحالة هي انعكاس للحقيقة ان حجم القشرة الكروية (الشكل 12 - 4) يزداد مع q^2 وكذلك مع ω^2 حيث ان ω تتناسب مع q



الشكل (12 - 4) كثافة النمط في وسط مستمر في ثلاثة ابعاد

لقد سبق وان اعتبرنا ان لكل قيمة من قيم q نمطاً واحداً من التذبذب ولكن هذا غير صحيح في ثلاثة ابعاد حيث ترافق كل قيمة لـ q موجة طولية واحدة وموجتين عرضيتين وبسرعة مختلفة لذا فان لكل قيمة من $\vec{q}$ علاقة التفريق للموجات الطولية والعرضية تكون مختلفة . اما اذا اهمل هذا الاختلاف وافترض ان النمطين لهما

السرعة نفسها فيمكن الحصول على كثافة الحالات الـكلية من المعادلة (53 - 4) وذلك بضربها بالرقم ثلاثة اي

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v_s^3} \qquad \ldots (4-45)$$

وسنستخدم هذه المعادلة في نموذج ديباي للحرارة النوعية في البند (3 - 8 - 4) .

4 - 7 كثافة الحالات للشبيكة

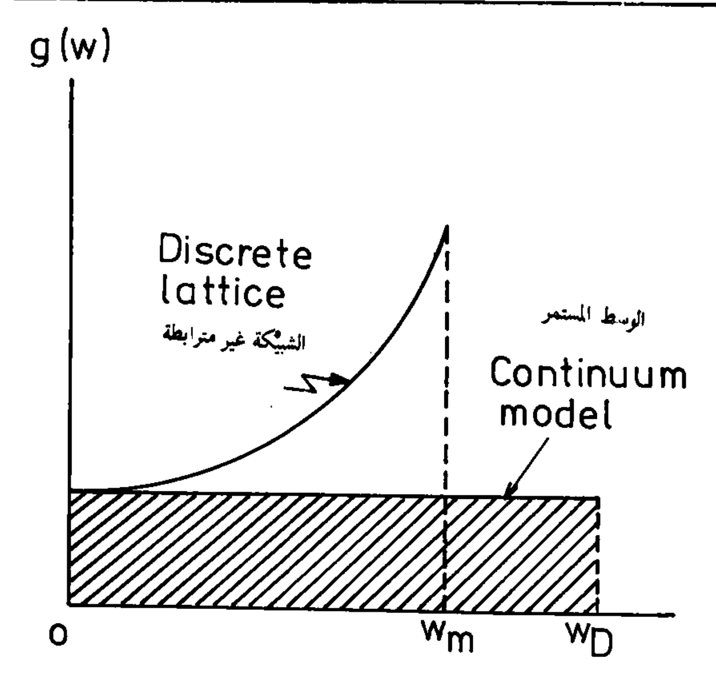
تعرف كثافة الحالات $g(\omega)$ بان $g(\omega)\,d\omega$ تمثل عدد الانماط في مدى الترددد ω , $\omega + d\omega$ وهذه الدالة تلعب دوراً مهماً في بعض الظواهر الفيزياوية المتعلقة باهتزازات الشبيكة وعلى الاخص الحرارة النوعية . في هذا البند سنناقش الدالة المناسبة للشبيكة الحقيقية (اي عندما تكون نقاط الشبيكة غيرمترابطة) ومن الممكن استخدام هذه النتيجة للحصول على النتيجة الدقيقة للحرارة النوعية . لقد تم اشتقاق معادلة كثافة الحالات $g(\omega)$ لوسط مستمرفي بعد واحد والمتمثلة بالمعادلة (44 - 4) واستخدمنا في اشتقاق هذه المعادلة علاقة التفريق (11 - 4)في حدود الموجات الطويلة ولـكن باستخدام علاقة التفريق للشبيكة غير المترابطة والمتمثلة بالعلاقة (10 - 4) يمكـن الحصول على العلاقة التاليه

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a\,\omega_m}\left[\cos\frac{qa}{2}\right]^{-1} \qquad \ldots (4-55)$$

الشكل 13 - 4 يبين العلاقة بين $g(\omega)$ و ω فهي تبدأ بقيمة معينة عند $\omega = 0$ ثم ترداد بازدياد ω وتصل الى اللانهاية عند $\omega = \omega_m$. عندما $\omega > \omega_m$ فان كثافة الحالات $g(\omega)$ تتلاشى لان هذه القيمة تقع خارج منطقة بريليون(Briloun zone

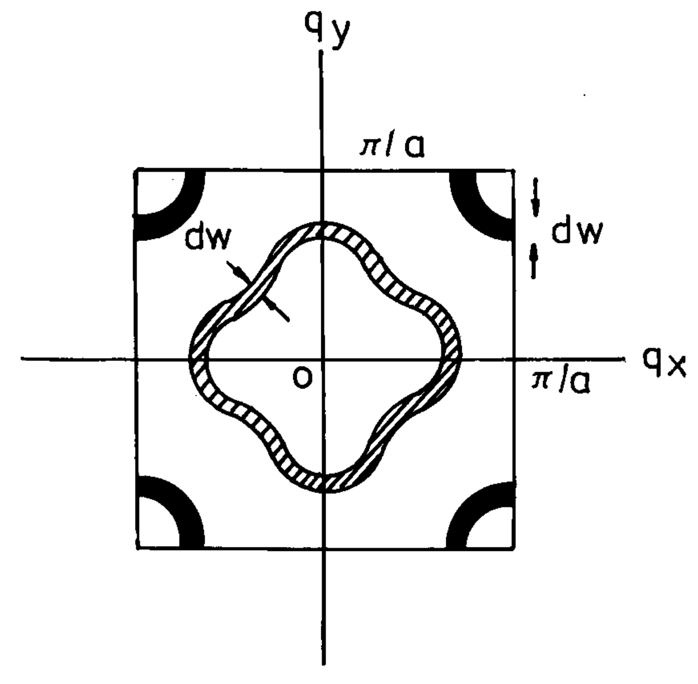
ان المسافة المظللة تحت المنحني من الشكل (18 - 4) تمثل العدد الـكلي للنمط والتي تساوي N . ويمكن ايجاد ذلك باجراء عملية التكامل على $g(\omega)$ فـي المعادلة (53 - 4) كذلك يوضح الشكل(13 -4)كثافة الحالات للوسط المستمر وفي بعد واحد حيث اعلى تردد فيه يساوي ω_D والمعروف بتردد ديباي Debye frequency . ان المساحة المخططة تساوي عدد نقاط الشبيكة N . لاحظ التغيرفي شكل $g(\omega)$ لحالة الشبيكة وعلى الاخص السلوك الانفرادي singularity

عند التردد ω_m حيث يرجع سبب ذلك الى حقيقة انه عند $\omega = \omega_m$ فان منحني التفريق $q - \omega$ يصل حالة الاشباع saturation كما في الشكل (2 - 4) ونتيجة لذلك فان عدداً كبيراً من الانماط سوف تقع ضمن مدى صغيرجداً من التردد .



الشكل (13 - 4) كثافة الحالات للشبيكة ذات البعد الواحد للمقارنة يبين كذلك كثافة الحالات للنموذج المستمر

ولايجاد $g(\omega)$ للشبيكة ذات ثلاثة ابعاد من الممكن اتباع الطريقة المستخدمة في البند السابق لنتصور j من فروع التردد . ونرسم الخطوط الكنتورية للتردد $\omega_j(\vec{q})$ و $\omega_j(\vec{q}) = \omega + d\omega$ كما مبين من الشكل(14 - 4)وبعد ذلك عدد الانماط المحصورة بين هذه السطوح يساوي $g_j(\omega)\, d\omega$ وبهذه الطريقة نجد $g_j(\omega)$ الشكل (14 - 4) يبين الخصائص العامة لدالة $g_j(\omega)$ عند الترددات الواطئة تزداد $g_j(\omega)$ بزيادة ω لان الانماط المتضمنة لهذا الجزء هي الانماط الصوتية ذات الامواج الطويلة . وكلما زاد ω اكثر تبدي دالة $g_j(\omega)$ بعض التراكيب حيث يتحدد بواسطة علاقة التفريق والتي بدورها تحدد شكل القشرة (shell) في الشكل(14 - 4)وبما ان علاقة التفريق تعتمد على ثابت القوة بين الذرات وهي بذلك تعتمد على نوع البلورة .



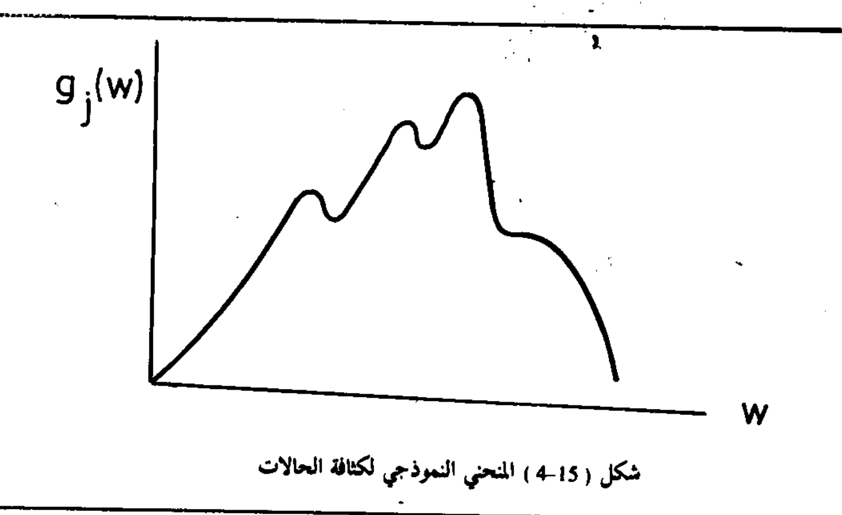
الشكل(4-14) تعداد عدد النمط للشبيكة ذات ثلاثة ابعاد . المنطقة المنقطة تمثل القشرة الواقعة داخل منطقة بريليون اما المنطقة الداكنة فيوضح الحالة عندما تكون الترددات عالية بحيث كنتور التردد تقاطع منطقة بريليون .

وعند تردد معين تبدأ $g_j(\omega)$ بالاخفاض سريعا وتتلاشى اخيرا تماما ويمكن فهم ذلك بالرجوع الى الشكل(4 - 14) عند بعض الترددات تبدأ القشرة بالتقاطع مع حدود نطاق بريليون وعندما يحدث ذلك يقل عدد الانماط داخل القشرة اي عندما يكون نصف قطر القشرة كبيرة بقدر كاف لكي تقع القشرة خارج نطاق بريليون كليا فان كثافة الحالات $g_j(\omega)$ تتلافى تماما .

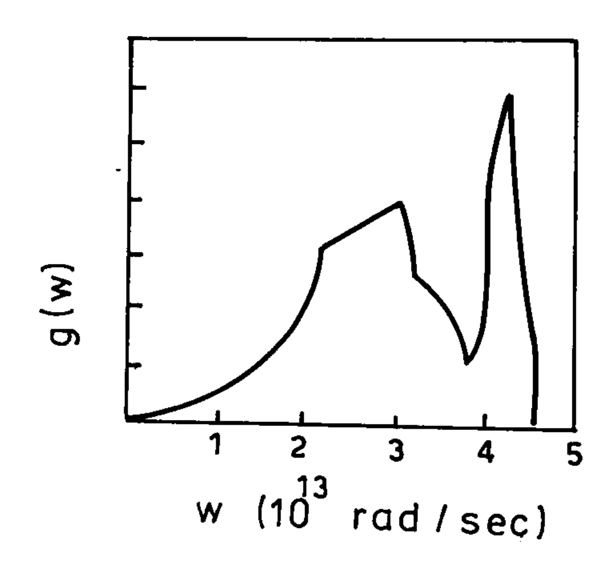
ولايجاد الكثافة الكلية للحالات $g(\omega)$ يجمع كثافة الحالات المنفردة اي

$$g(\omega) = \Sigma g_j(\omega) \qquad \dots (4-56)$$

الكثافة الكلية $g(\omega)$ تبدي السلوك المبين في الشكل(4 - 15) وتظهر بعض التراكيب المعقدة بسبب تداخل الفروع المختلفة . الشكل(4 - 16) يبين كثافة الحالات للنحاس حيث وجد بطريقة استطارة النيوترونات .



شكل (4-15) المنحني النموذجي لكثافة الحالات



الشكل(4-16) كثافة الحالات الكلية g (w) مقاسة بطريقة استطارة النيوترونات

4-8 الحرارة النوعية

تتضح الحرارة النوعية (C) عادة بالعلاقة

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T}$$

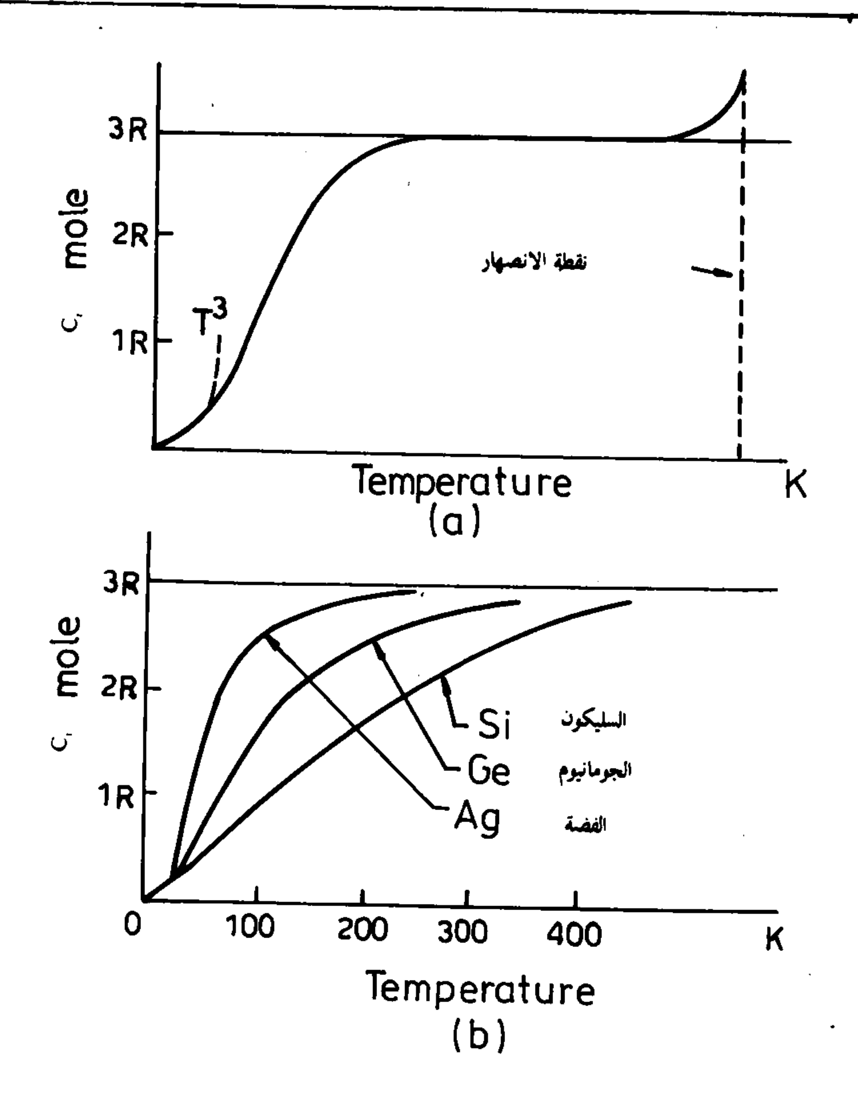
حيث ΔQ هي كمية الحرارة اللازمة لرفع درجة حرارة مول واحد بمقدار ΔT .اذا اجريت العملية تحت حجم ثابت كما هي الحالة في المواد الصلبة ، فان $\Delta Q = \Delta E$ حيث ΔEهي الزيادة الحاصلة في الطاقة الداخلية للمادة الصلبة . لذلك يمكن التعبير عن الحرارة النوعية بالصيغة الرياضية التالية .

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \qquad \ldots (4 - 57)$$

تعتمد الحرارة النوعية C_v للمواد الصلبة على درجة الحرارة لتلك المادة والشكل (4 - 17a) يبين السلوك العام لتغير الحرارة النوعية مع درجة الحرارة اما الشكل 4 - 17b فيوضح الحرارة النوعية التجريبيه لثلاث مواد مختلفة ان تغير الحرارة النوعية مع درجات الحرارة الموضحة في الشكل (4 - 17a) هي الشكل العام لجميع المواد الصلبة تقريبا ، والاختلاف الوحيد بينها يظهر في درجات الحرارة الواطئة . ويمكن تلخيص الحقائق التجريبية الخاصة بالحرارة النوعية في النقاط التالية

1- عند درجات الحرارة العالية اي اعلى من درجة حرارة الغرفة فان الحرارة النوعية لاتعتمد على درجة الحرارة وتساوي (3R) حيث R يمثل الثابت العام للغازات ويساوي 25 جول / مول . كلفن .

2- كلما قلت درجة الحرارة فان الحرارة النوعية تقل بصورة واضحة لاحظ الشكل (4 - 17a) وتقترب من الصفر . ففي درجات الحرارة الواطئة والقريبة من الصفر المطلق تتناسب الحرارة النوعية مع T^3 في العوازل ومع T في المعادن . ان التفسير النظري لهذه الحقائق التجريبية كان من اهم المشاكل النظرية في بداية هذا القرن. في هذا البند نحاول ان نستعرض النماذج النظرية الموضوعة لتفسير تغير الحرارة النوعية مع درجة الحرارة .



الشكل (4-17) الشكل العام لتغير الحرارة النوعية مع درجات الحرارة .
– المنحنى التجريبي للحرارة النوعية للفضة Ag، . واجرمانيوم Ge والسيلكون Si

4-8-1 النموذج الكلاسيكي

الطريقة المستخدمة لوصف المادة الصلبة في هذا النموذج هي ان كل ذرة مرتبطة بجاراتها بقوة توافقية (harmonic force) حيث عند تسخين المادة الصلبة فان الذرات تتذبذب حول مواقعها ويمكن تصور المادة وكأنها مجموعة من المتذبذبات المتحركة ومعدل الطاقة الحركية للمتذبذب تعطي بالعلاقة التالية

$$E = K_B T \qquad \ldots (5-57)$$

حيث K_B هو ثابت بولتزمان . ان معدل الطاقة للذرة الواحدة باعتبارها متذبذباً ذات ثلاثة ابعاد هي $3K_BT$ وبذلك فان الطاقة الكلية لمول واحد من الصلب هي

$$E = 3N_A K_B T \qquad \ldots (4-58)$$

حيث N_A هو عدد افوكادرو . وعند التعويض عن $R = N_A K_B$ حيث R ثابت الغازات وبتفاضل المعادلة (58 - 4) نحصل على

$$C_v = 3R \qquad \ldots (4-59)$$

وتعرف هذه النتيجة بقانون ديلونك – بيتت (Doloung-Pitit) وهذا القانون يحقق النتائج العملية عند درجات الحرارة العالية ولكن هذه النظرية تفشل تماماً عند درجات الحرارة الواطئة حيث ان الحرارة النوعية تعتمد على درجات الحرارة بصورة كبيرة .

4-8-2 نموذج آينشتاين

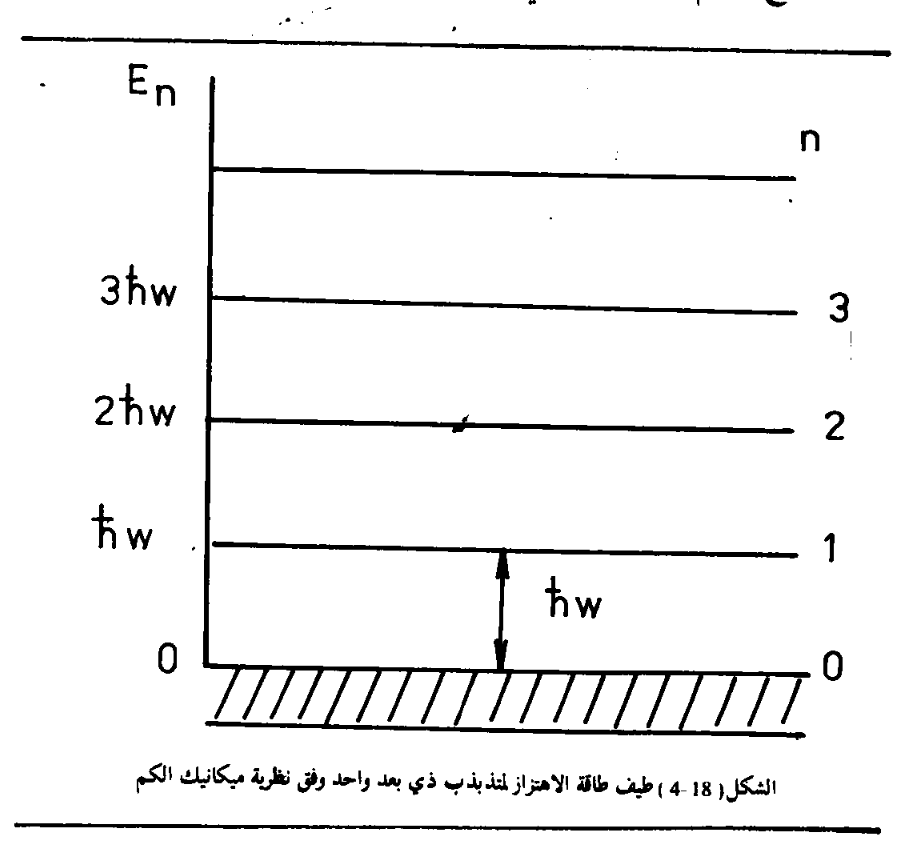
في هذا النموذج تعامل الذرات على انها متذبذبات مستقلة (independet oscillators) وتتضح طاقة المتذبذب بالميكانيك الكم وليس بالصيغة الكلاسيكية وطبقا لقانون ميكانيك الكم فان طاقة المتذبذب تكون بكمات متقطعة . اي

$$E = nh\omega \qquad \ldots (4-60)$$

حيث n هي اعداد صحيحة موجبة او صفر و ω هي تردد المتذبذب هكذا فان طاقة المتذبذب مكممة وعندما $n = 0$ تمثل الحالة الدركية (ground state) فان الطاقة المتوقعة لهذه الحالة تساوي صفر $(E=0)$ ولكن في الحقيقة ان المتذبذبات تتذبذب حتى عند هذه الحالة ولها طاقة قدرها $\frac{1}{2} h\omega$ وتسمى طاقة نقطة الصفر (Zero-point enery)

وبما ان اعتماد هذه الطاقة على درجة الحرارة فيمكن اهمالها في مناقشة الحرارة النوعية.

عندما يكون المتذبذب في حالة متهيجة وذلك بارتفاع درجة الحرارة يحدث طيف متقطع منتظم المسافات كما في الشكل (18 - 4)



الشكل (18 -4) طيف طاقة الاهتزاز لمتذبذب ذي بعد واحد وفق نظرية ميكانيك الكم

ان المعادلة (60 - 4) تمثل طاقة متذبذب مستقل ومعزول ولكن المتذبذبات الذرية في الحالة الصلبة ليس معزولة حيث انها تتبادل الطاقة مع جاراتها باستمرار ومعدل قيمتها عند التوازن الحراري يتضح باجراء عملية التجميع على طاقة المتذبذبات بدلا من عملية التعامل المستخدمة في الاحصاء الكلاسيكي وكما يلي :

$$< E > = \sum_{n=0}^{n=\prime} E_n e^{-E/K_B T} / \sum_{n=0}^{n=\prime} e^{-E/K_B T} \quad \ldots (4-61)$$

ان الدالة الاسية e^{-E/K_BT} هي عامل بولتزمان والذي يعطي احتمالية كون مستوى الطاقة E_n مشغولاً . لقد ادخلنا عملية الجمع الكلي (Σ) في المقام للتعبير (normallization) فقط . بالتعويض عن $E = nh\omega$ و $x = \frac{h\omega}{K_BT}$ في الطرف الايمن من المعادلة (61 – 4) نحصل على .

$$h\omega \sum_n e^{-nx} / \Sigma e^{-nx}$$

وعليه يمكن كتابة هذه المعادلة على شكل التفاضل التالي

$$-h\omega \frac{d}{dx} [\log \sum_n e^{-nx}]$$

والجمع الكلي داخل القوس هوسلسلة هندسية وتعطي النتيجة التالية :

$$-h\omega \frac{d}{dx} [\log \sum_n e^{-nx}] = h\omega \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{h\omega}{e^x - 1}$$

لذا فان معدل الطاقه للمتذبذب وفق نظرية اينشتاين هو

$$< E > = \frac{h\omega}{e^{h\omega/K_BT} - 1} \qquad \dots (4 - 62)$$

وبذلك فان معدل عدد الفوتونات هو

$$< n > = \frac{1}{e^{h\omega/K_BT} - 1} \qquad \dots (4 - 63)$$

ان المعادلة الاخيرة هي الصيغة التي استخدمها بلانك في نظريته عن اشعاع الجسم الاسود. ان فكرة تكميم الطاقة استخدم لاول مرة من قبل اينشتاين لمعالجة نظرية الحرارة النوعية .

من الممكن الان ايجاد الطاقة الكلية للمادة الصلبة باعتبار ان كل ذرة لها ثلاث درجات حرة من التذبذب وبذلك يكون مجموع المتذبذبات $3N_A$ اي ان معدل الطاقة الكلية للنظام هو

$$< E > = 3N_A \frac{h\omega_E}{e^{h\omega_E/K_BT} - 1} \qquad \dots (4 - 64)$$

حيث استخدمنا ω_E ، تردد اينشتاين لتعرف التردد المميز للمتذبذبات . ومن الممكن الان ايجاد الحرارة النوعية بتفاضل هذه العلاقة والحصول على

$$C_v = 3R\left(\frac{h\omega_E}{K_B T}\right)^2 \frac{e^{h\omega_E/K_B T}}{(e^{h\omega_E/K_B T} - 1)^2} \qquad \dots (4-65)$$

وهذه المعادلة يمكن ان تبسط بادخال درجة حرارة اينشتاين θ_E حيث $\theta_E = \frac{h\omega_E}{K_B T}$

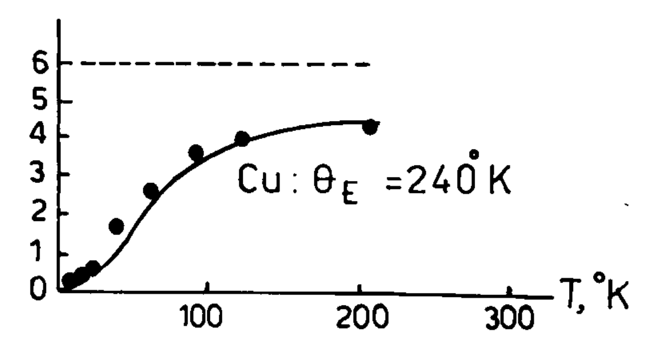
وبا ... تختزل العلاقة (4-65) الى

$$C_v = 3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} \qquad \dots (4-66)$$

ان هذا النموذج يتفق مع النتائج التجريبية على الاقل وصفياً وعلى مدى جميع درجات الحرارة فنلاحظ عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر فان السعة الحرارية تقترب من الصفر ايضا وهي من المميزات التي تفتقر اليها النظرية الكلاسيكية .

ان درجة اينشتاين θ_E في المعادلة(66- 4)قد اختيرت للحصول على توافق بين النتائج النظرية والنتائج التجريبية وعلى مدى جميع درجات الحرارة والشكل(19 - 4) يبين مدى تطابق هذا النموذج مع النتائج التجريبية للنحاس حيث وجد ان $\theta_E = 240K$

أن هذا التوافق بين النتائج العملية والنظرية وعلى هذا المدى في درجات الحرارة بتغير عامل (θ_E) فقط يعتبر نتيجة حيدة وجدير بالملاحظة هنا أنه من الممكن حساب



الشكل(19 4) تغيير الحرارة النوعية للنحاس مع درجة الحرارة .
النقاط تمثل النتائج التجريبية والمحني يمثل معادلة اينشتاين

تردد أينشتاين ω_E بمجرد ايجاد قيمة θ_E فمثلاً عند ماتكون $\theta_E = 240\text{K}$ فأن التردد $\omega_E = K_B\theta_E h$ ويكون في حدود 2.5×10^{13} هرتز والذي يقع في منطقة تردد الاشعة تحت الحمراء ونحاول الان اختيار نموذج أينشتاين في حدود درجات الحرارة العالية ودرجات الحرارة الواطئة .

في حدود درجات الحرارة العالية أي عندما تكون $1 > \frac{\theta_E}{T}$ وهذا يعني أن

$$e^{\theta_E/T} - 1 = 1 + \frac{\theta_E}{T} + \ldots$$

وبالتعويض عن هذه المعادلة في المعادلة (66 - 4) نحصل على

$$C_v = 3R \qquad \ldots (4-67)$$

وهذه تتفق مع النتيجة الـكلاسيكية

اما في درجات الحرارة الواطئة أي عندما $1 << \frac{\theta_E}{T}$.
فأن $e^{\theta_E/T} >> 1$ وبذلك تختزل معادلة أينشتاين الى

$$C_v = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 e^{-\theta_E/K_B T} \qquad \ldots (4-68)$$

والواضح من العلاقة الاخيرة أن الحرارة النوعية تقترب من الصفر أسياً وتصبح صفراً عندما تكون $T = 0K$.

بالرغم من أن الحرارة النوعية تقترب من الصفر عندما تقترب درجة الحرارة من من الصفر المطلق فأن الطريق التي تقترب بها الى الصفر لاتتفق مع النتائج التجريبية في معادلة أينشتاين أن الحرارة النوعية تقترب من الصفر أسياً بينما يبين النتائج التجريبية أن الحرارة النوعية تقترب من الصفر كدالة لـ T^3 . وهذه في الحقيقة نقطة الضعف في نموذج أينشتاين والتي عولجت من قبل العالم ديباي (Debye) .

4-8-3 نموذج ديباي

افترض أينشتاين في نموذجه أن ذرات المادة الصلبة تذبذب بصورة مستقلة عن بعضهما البعض ولكن فكرة الاستقلالية في التذبذب هنا ليس فكرة عملية لان الذرات تتفاعل وحركة ذرة ما تؤثر على جاراتها وحركة هذه الذرات بدورها تؤثر على جاراتها وهكذا بحيث أن حركة احدى الذرات اينما كانت في المادة الصلبة تؤثر على جميع الذرات الاخرى الموجودة لذلك من المناسب اعتبار حركة الشبيكة ككل وليس ذرة معينة مستقلة كما افترض من قبل أينشتاين .

- أن المثال الواضح لاهتزاز البلورة ككل هو الموجات الصوتية عندما تنتشر موجة صوتية في جسم صلب ما ، فأن الذرات لاتتذبذب بأستقلالية بل تنسق حركتها بحيث أن جميع الذرات تتحرك بالسعة نفسها بعلاقة طورية ثابتة اي انها تخضع لعلاقة الانتشار ($\omega = V_s q$)

أن استخدام هذه العلاقة لحساب الحررة النوعية يعني أن تردد اهتزاز الشبيكة يغطي مدى واسعاً من القيم لانه كلما يتغير قيمة q يتغير ω وهذا على عكس نموذج أينشتاين والذي إفترض فيه قيمة واحدة للتردد . أن أوطأ تردد في نموذج ديباي هو $\omega = 0$ والذي يقابل طول الموجي $\lambda = \infty$.

أن افتراض علاقة الانتشار الصوتي اعلاه على موجات الشبيكة هو افتراض تقريبي لان هذه الفرضية تهمل عدم الترابط الموجود في الشبيكة وتنطبق هذه الفرضية بصورة جيدة على الموجات الطويلة حيث يكون تأثير عدم الارتباط غير مهم ولكن عندما تكون الاطوال الموجية قصيرة الى حد يمكن مقارنتها بالمسافة البينية للذرات فأن الفرضية غير صحيحة .

لنحسب الان الحرارة النوعية على أساس نموذج ديباي .

ان كل نمط يكافيء متذبذباً توافقاً معدل طاقته تتضح بالعلاقة (4 - 62) لذا فان مجموع طاقة التذبذب لكل الشبيكة تتضح بالعلاقة .

$$U = \int < E > g(\omega)\, d\omega \qquad \ldots (4-69)$$

حيث تجري عملية التكامل على جميع الترددات المسموح بها .

فأن $g(\omega)$ تمثل دالة كثافة الحالات و $g(\omega)\,d\omega$ هو عدد الانماط في مدى $\omega, \omega + d\omega$ و $\langle E \rangle$ معدل الطاقة لكل نمط من الانماط المتذبذبة أو بتعبير أخر فقد عامل ديباي الشبيكة المتذبذبة على شكل مجاميع من النمط (collective modes) .

تتذبذب بصورة مستقلة عن بعضها الاخر كما لو أنها وسط مستمر . اذا عوضنا عن قيمة $g(\omega)$ من المعادلة (4 - 53) , $\langle E \rangle$ من المعادلة (4 - 62) فأن مجموع الطاقة الكلية يتضح بالعلاقة التالية :

$$U = \frac{3V}{2\pi^2 V_s^3} \int \omega^2 \frac{h\omega}{e^{h\omega/K_B T} - 1} d\omega \qquad \dots (4-70)$$

ولاجراء عملية التكامل على المعادلة (4 - 70) علينا ان نعرف الحدود الدنيا والعليا لطيف التردد . أن الحد الادنى هو $\omega = 0$ أما التردد الاعلى (ω_D) فقد حدد من قبل ديباي ، حيث افترض أن العدد الكلي للانماط المتذبذبة يجب أن يساوي عدد الدرجات الحرة لجميع ذرات المادة الصلبة وهذا العدد يساوي $3N_A$ لان كل ذرة تملك ثلاث درجات حرة ويمكن أن نعبر عن هذا بدلالة كثافة الحالات كمايلي :

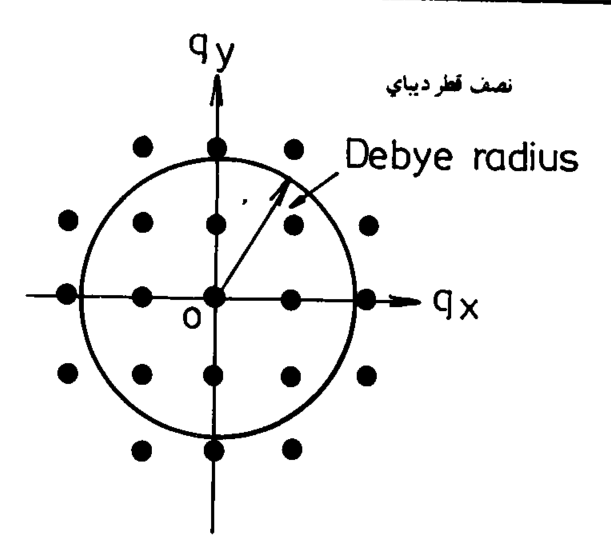
$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\, d\omega = 3N_A \qquad \dots (4-71)$$

حيث ω_D تردد القطع (cut off frequency) ويسمى بتردد ديباي . يمكن ايجاد تردد ديباي ω_D وذلك بالتعويض عن $g(\omega)$ من المعادلة (4 - 53) في في المعادلة (4 - 71) واجراء عملية التكامل نحصل على :

$$\omega_D = V_s\,(6\pi^2 n)^{1/3} \qquad \dots (4-72)$$

حيث $n = \frac{N_A}{V}$ يمثل تركيز الذرات في المادة الصلبة .

ويمكن أيضاً اشتقاق المعادلة (4 - 72) هندسياً وذلك برسم الخطوط الكنتورية التي تمثل تردد ديباي $\omega = \omega_D$ في فضاء $\vec{q}$ فنحصل على كرة تتضمن عدداً من نقاط $\vec{q}$ تساوي N_A لاحظ الشكل (4 - 20) .



الشكل 20 - 4 كرة ديباي

اخذين بنظر الاعتبار أن كل نقطة داخل هذه الكرة تمثل ثلاثة انماط احدها طولي واثنان عرضيان وبذلك يكون عدد الانماط $3N_A$ ويسمى هذا الشكل بكرة ديباي وقطرها يسمى بقطر ديباي (q_D) وبما أن عدد النقاط داخل الكرة هو $\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} q_D^3$

وعلية فأن نصف قطر الكرة q_D يجب أن يحقق .

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} q_D^3 = N_A$$

بحل هده المعادلة يمكن الحصول :

$$q_D = (6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \qquad \dots (4-73)$$

ويمكن الان حساب تردد ديباي ω_D وذلك بالتعويض عن q_D في المعادلة (72 - 4) .

لنرجع الى حساب الطاقة الكلية للنظام مستخدماً العلاقة :

$$U = \frac{3V}{2\pi^2 V_s^2} \int_D^{\omega_D} \frac{h\omega^3}{e^{h\omega / K_B T} - 1} d\omega \qquad \dots (4-74)$$

والان بالتعويض عن $\frac{V}{V_s^3}$ من المعادلة (4 - 72) يمكن الحصول على

$$U = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{h\omega^3}{e^{h\omega/KT} - 1} d\omega \qquad \dots (4 - 75)$$

من الممكن تبسيط هذه المعادلة وذلك بأدخال درجة الحرارة θ_D المعروفة بدرجة حرارة ديباي (Debye temperature) والتي تكون عندها معدل الطاقة الحررية الكلية للمتذبذب تساوي كمية من الطاقة مقدارها $h\omega_D$ اي $K_B\theta_D = h\omega_D$ وبالتعويض عن قيمة $x = \frac{h\omega}{K_BT}$ وكذلك $X_{max} = \frac{\theta_D}{T}$ في المعادلة 4 - 75 نحصل على

$$U = (9NK_BT^4 / \theta_D) \int_0^{X_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \qquad \dots (4 - 76)$$

$$U = 9RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 f \left(\frac{\theta_D}{T} \right)$$

حيث $f\left(\frac{\theta_D}{T}\right)$ تعرف بدالة ديباي . لنناقش معادلة ديباي عند درجات الحرارة العالية ان عندما $T >> \theta_D$ اي $\frac{\theta_D}{T} << x << 1$ وبذلك فان المعادلة (4 - 75) تصبح .

$$U = 9RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3\, dx}{1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots}$$

$$= 9RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \left[\frac{1}{3} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^3 - \frac{1}{8} \left(\frac{\theta_D}{T} \right)^4 \right]$$

وعلية فأن :

$$U = 3RT$$

و

$$C_v = 3R$$

وهذه النتيجة مطابقة لينتيجة النظرية الكلاسيكية .

أما عندما تكون درجة الحرارة واطئة أي أن $T<<\theta_D$ فأن $1<<x<<\frac{\theta_D}{T}$ وهذا يعني أن الحد الاعلى للتكامل في دالة ديباي يمكن ان يصبح اللانهاية أي

$$f\left(\frac{\theta_D}{T}\right) = \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

لذا فأن الطاقة الكلية للنظام هي :

$$U = \frac{9}{15} \pi^4 RT \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \qquad \ldots (4-76)$$

وكذلك الحرارة النوعية في درجة الحرارة الواطئة هـي :

$$C_v = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \qquad \ldots (4-78)$$

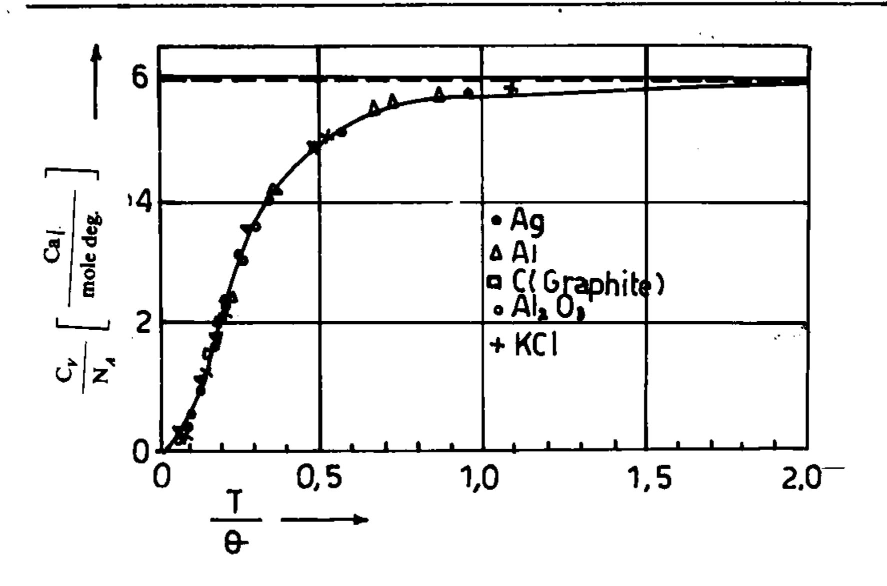
وهذه المعادلة تعرف بقانون ديبـاي .

ان نموذج ديباي يتفق بصورة جيدة مع النتائج التجريبية في درجات الحرارة الواطئة ($T < \frac{\theta_D}{12}$)وكذلك في درجات الحرارة العالية ($T > \theta_D$) ولكنه لا يتفق بصورة جيدة مع النتائج التجريبية في درجات الحرارة المتوسـطة .

وفقا لنموذج ديباي فان العلاقة بين الحرارة النوعية و درجة الحرارة لجميع المواد الصلبة يمكن ان تمثل بمنحني عام . ويمكن الحصول على هذا المنحني بتقسيم الحرارة النوعية على عدد نقاط الشبيكة في وحدة الخلية للمادة الصلبة . ثم رسمه مع درجة الحرارة المختزلة $\left(\frac{T}{\theta_D}\right)$. والمثال على ذلك . عند مقارنة الحرارة النوعية لعنصر الصوديوم مع مركب كلوريد الصوديوم نجد ان

$$\frac{C_v}{N_A} = (Na) = \frac{C_v}{2N_A} (NaCl)$$

حيث مول واحد من الصوديوم يحتوي على N_A من نقاط الشبيكة ومول واحد من $NaCl$ يحتوي على $2N_A$ من نقاط الشبيكة . لقد اختبرت هذه الحقيقة عملياً للعناصر والمركبات المختلفة كما هي موضحة في الشكل (22 - 4) ولوحظ ان هذه النتائج تبقى صحيحة .



الشكل(22-4) تغير الحرارة النوعية مع درجة الحرارة المختزلة لخمس مواد مختلفة .

من الممكن ايجاد درجة ديباي θ_D عملياً وذلك باستخدام المعادلة التالية

$$\theta_D = (6\pi n)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{\hbar}{K_B} \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \qquad \ldots (4-79)$$

حيث Y هو معامل يونك للمطاوعة و ρ كثافة المادة الصلبة وباستخدام $\rho = nM$ يكون لدينا

$$\theta_D \propto \sqrt{\frac{Y}{M}}$$

حيث M كتلة ذرة المادة الصلبة وبذلك فان θ_D تعتمد على معامل يونك وعلى كتلة الذرة . وهذا يعني انه كلما كانت البلورة اصلب (Stiffer) وكانت كتلة المادة صغيرة فسيكون θ_D اكبر لهذه المادة . لذلك نتوقع بان المواد الخفيفة يكون لها θ_D اكبر من المواد الثقيلة . ان العناصر القلوية مثل الليثيوم تكون درجة حرارة ديباي للصوديوم $\theta_D = 160\ K$. بينما للعناصر التي لها تركيب الماس مثل السليكون فان $\theta_D \sim 640\ K$ وللكاربون $\theta_D \sim 2000\ K$ بان للعناصر الشبيه بالالماس درجات ديباي عالية ليس بسبب خفة ذراتها فقط وانما بسبب قوة

الاواصر التساهمية بين ذراتها . الجدول (1-4) يبين درجة حرارة ديباي لمجموعة من العناصر والمركبات .

الجدول (4 - 1) درجة ديباي لبعض العناصر والمركبات

العناصر	$\theta_D K$	المركبات	$\theta_D K$
Li	344	NaCl	280
Na	160	KCl	230
K	91·1	CaF_2	470
Cu	343	LiF	680
Ag	226	SiO_2	225
Au	162		
Al	428		
Ga	325		
Ge	378		
Si	640		

4-9 التوصيلية الحرارية

عندما تكون نهايتا قضيب من مادة معينة في درجة حرارة مختلفة T_1 و T_2 حيث $T_2 > T_1$ ، فان الحرارة سوف تسري باتجاه الانحدار الحراري ، اي من النهاية الساخنة الى النهاية الباردة كما هو موضح في الشكل (4-23) . ان كثافة التيار الحراري (التيار لوحدة المساحة) تتناسب مع الانحدار الحراري $\left(\frac{\partial T}{\partial X} \right)$ أي أن

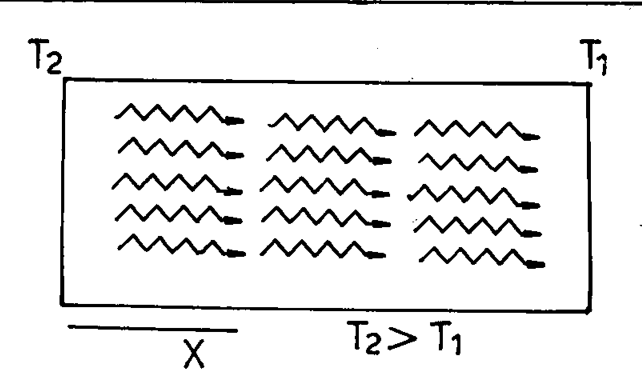
$$Q = \frac{\partial T}{\partial X} \qquad \dots (4\text{-}80)$$

حيث ان θ يمثل كثافة التيار الحراري

وان ثابت التناسب K_l يسمى بمعامل التوصلية الحرارية وهو مقياس لعملية الانتقال الحراري عبر القضيب (وضعنا الاشارة سالبة لكي تبقى K_l كمية موجبة) . يمكن ان تنقل الحرارة في المواد بعدة عوامل مستقلة . ففي المعادن مثلاً تنقل الحرارة بواسطة كل من الالكترونات والفونونات وتساهم الالكترونات بدور اكبر في عملية التوصيل الحراري . اما في العوازل فتنقل الحرارة كلياً بواسطة الفونونات وذلك لقلة الالكترونات الحرة . ولذلك سوف نركز في هذا البند على عملية انتقال الحرارة بواسطة الفونونات فقط .

عند مناقشة انتقال الحرارة بواسطة الفونونات ، من الملائم ان تصور غاز الفونونات كما مبين في الشكل (4-23) ، داخل النموذج . ففي جميع مناطق الكائنة داخل النموذج هنالك فونونات تتحرك بصورة عشوائية في جميع الاتجاهات متمثلة بـ q داخل منطقة بريليون . ان نموذج غاز الفونونات يشبه كثيراً المفاهيم المعروفة للنظرية الحركية للغازات ويمكن تطبيقها هنا كذلك وعلى وجه الخصوص لخاصية التوصيل الحراري والتي تمثل بالعلاقة التالية .

$$K_l = \frac{1}{3} C_v V l \qquad \dots (4\text{–}81)$$



الشكل (4-23) التوصيلية الحرارية بواسطة الفونونات داخل نموذج من العازل

حيث C_v هي الحرارة النوعية لوحدة الحجم V , l هما سرعة الفونون ومعدل مساره الحر (mean free path) على التوالي

لندرس الان المعادلة (4-81) حيث نلاحظ ان معامل التوصلية الحرارية يعتمد على درجة الحرارة ضمنياً ، وذلك لان C_v تعتمد على درجة الحرارة وقد ناقشنا في البند السابق . اما سرعة الفونون فقد وجدت اساساً غير معتمدة كثيراً على درجة الحرارة على عكس معدل المسار الحر (l) والذي يعتمد اعتماداً كبيراً على درجة الحرارة . بمراجعة النظرية الحركية للغازات و بمقارنة معادلتهما نجد ان (l)

هو معدل المسافة التي يقطعها الفونون بين تصادمين متتالين ، لذا فان قيمة l تحدد بعملية التصادم التي تحدث داخل المادة الصلبة وهناك ثلاثة عمليات تصادم مهمة يمكن تميزها :

- a- تصادم الفونون مع فونون أخر
- b- تصادم الفونون مع عيوب البلورة (كالشوائب والعيوب الناشئة عن ازاحة الذرات (disocation) عن مواقعها الاصلية والنظائر (isotopes)
- c- تصادم الفونون مع الحدود الخارجية للنموذج

ولكل من هذه العمليات الثلاثة هناك معدل المسار الحر الخاص بها وليكن l_a و l_b و l_c على التوالي ولكل من هذه العمليات هناك المقاومة الحرارية الخاصة بها وليكن w_a و w_b و w_c على التوالي وجميعها تعتبر مصدر المقاومة الحرارية الكلية ω وعليه فان :

$$\omega = \omega_a + \omega_b + \omega_c \qquad \ldots (4-82)$$

ومعدل المسارات الحرة الكلية (l) تساوي

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_a} + \frac{1}{l_b} + \frac{1}{l_c} \qquad \ldots (4-83)$$

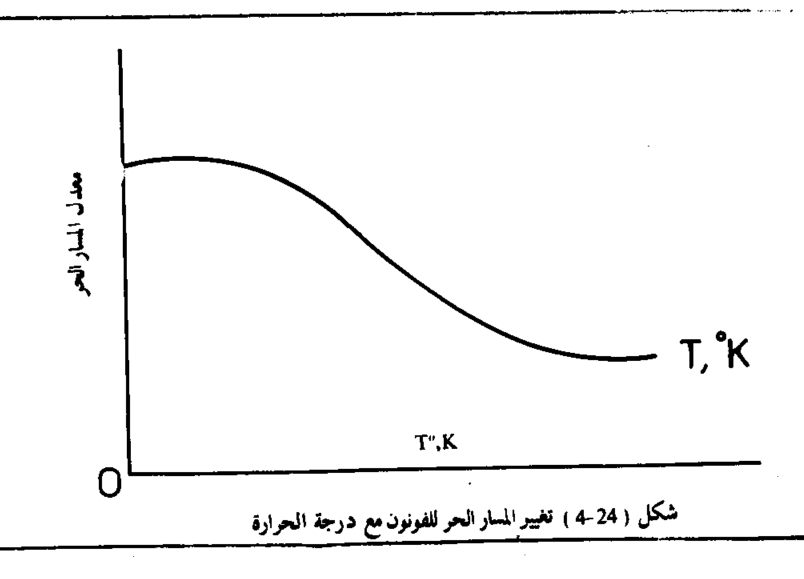
اذا اعتبرنا ان جميع التصادمات المذكورة اعلاه ذات اهمية متساوية فان المعالجة النظرية لها تكون معقدة جداً . لذا نختصر المناقشة هنا لحالة ما عندما يكون نوع من التصادم هو المهمين .

لو اخذنا التصادم من نوع (a) نجد عندما يتصادم الفونون مع فونوناً اخر في البلورة فان الفونونين يتشتتان عن بعضها نتيجـــة التفاعل اللا توافقي (التفاعل اللا توافقي يحصل عندما تصبح المسافة بين ذرات محسوسة) فان عملية تصادم الفونون مع الفونون

مهمة عمليا عند الدرجات العالية التي تكون عندها المسافة بين الذرات كبيرة نوعاً ما وفي هذه الحالة يتناسب معدل مسار الحر تناسباً عكسياً مع درجة الحرارة ويبدو هذا مقبولاً لان كلما كانت درجة الحرارة كبيرة كان عدد الفونونات المشاركة في التصادم كبيرة .

اما بالنسبة لتفاعل الفونون مع عيوب البلورة (كالشوائب والتشوهات مثلاً) فان العيوب تشتت الفونونات لان هذه العيوب تحطم الدورية التامة في الشبيكة والتي هي الاساس لفكرة الانتشار الحر (free propagation)لموجات الشبيكة .

عند درجات الحرارة الواطئة جداً ($T < 10\ K$) فان كلاً من تصادم الفونون مع فونون وعيوب الشبيكة ذات تأثير مهمل وذلك لقلة عدد الفونونات عند درجات الحرارة الواطئة وان هذة الفونونات المتهيجة عند هذه الدرجة الواطئة تكون ذات امواج طويلة . واءن احتمالية التفاعل بين هذه الامواج الطويلة وعيوب الشبيكة تكون قليلة ، لان بعد العيوب اقل بكثير من الطول الموجي لهذه الموجة . لذا عند درجات الحرارة الواطئة فان عملية التصادم المهيمنة هي التصادم مع الحدود الخارجية للنموذج . والتي تؤدي الى ما يسمى بالتأثيرات الحجمية (size effect) وتصبح هذه العملية مؤثرة لان الطول الموجي للفونون المتهيج يكون كبيراً جداً بالمقارنة مع حجم النموذج ومتوسط المسار الحر هنا $l \simeq D$ حيث D هي تقريباً تساوي قطر النموذج ، وبذلك l لا تعتمد على درجة الحرارة.ويكون السلوك العام المتوسط مسار الحر مع درجة الحرارة كما في الشكل (4-24)



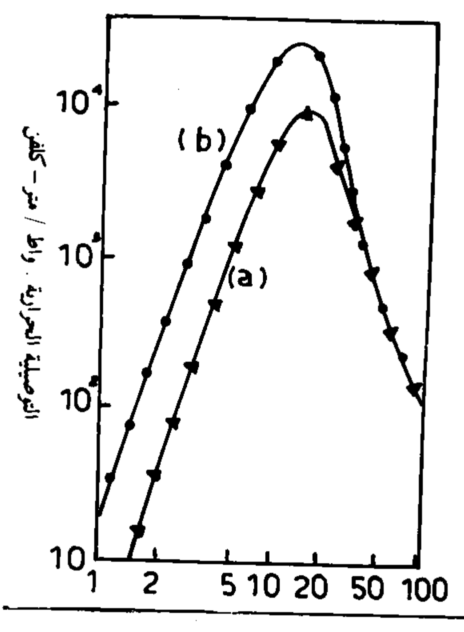
شكل (4-24) تغيير المسار الحر للفونون مع درجة الحرارة

عند درجات الحرارة الواطئة فان متوسط المسار الحر للفونون يكون ثابتاً 1 (l = D) بينما عند درجات الحرارة العالية فانها تقل كدالة $\frac{1}{T}$ و الجدول (4-2) يبين قيم 1 لمواد مختلفة لدرجتين حراريين مختلفين .

جدول 2 - 4 معدل مسار الجر للفونونات في بعض المواد الصلبة عند درجة و

	l, cm at 273° K	l, cm at T = 20°K
SiO_2	97	$7{\cdot}5 \times 10^{-3}$
CaF_2	72	$1{\cdot}0 \times 10^{-3}$
NaCl	67	$2{\cdot}3 \times 10^{-4}$
Si	150	$4{\cdot}1 \times 10^{-2}$
Ge	70	$4{\cdot}5 \times 10^{-3}$

ان الشكل(25-4) يبين تغيير التوصلية الحرارية مع درجة الحرارة عملياً حيث نرى انه عند درجات الحرارة الواطئة فان تغير K_l يعتمد بصورة رئيسية على الحرارة



الشكل (25-4) تغيير التوصيلية الحرارية مع درجة الحرارة للبلورة الاحادية من نوع LiF

a- مساحة المقطع للنموذج = 0·91 × 1.33 ملم

b- مساحة المقطع للنموذج = 6·97 × 7.55 ملم

النوعية C_v ، بينما عند درجات الحرارة العالية فان $K_l \alpha \frac{1}{T}$ وهذا يعني انه التوصيلية الحرارية عند درجات الحرارة العالية تعتمد كليا على مسار الحر للفونونات وهذه الاستنتاج يتفق مع النتائج التجريبية الموضحة في الشكل (4-25)

4-10 العمليات الاعتيادية وعمليات امكلاب

قبل الدخول في شرح العمليات الاعتيادية (Normal process) وعمليات امكلاب (Umklapp process) وتاثيرها على التوصلية الحرارية لنشرح باختصار التاثيرات اللاتوافقية (Anhamonic effects) في البلورة . وفقاً لقانون هوك فان الطاقة للذرة المهتزة تاخذ الصيغة التالية

$$U = U_0 + A (r - r_0)^2 \qquad \dots (4-84)$$

حيث r_0 موضع الاستقرار تعتبر هذه الحالة مثالية حيث تطبق عندها مفاهيم التراكب (Superposition) بين موجات الشبيكة المهتزة بدقة . وتنعدم عملية التصادم بين الفونونات وبذلك فان متوسط مسار الحر للفونون يكون اللانهاية ولكن هذا الاهتزاز المثالي لا يحدث عملياً وان طاقة الذرة المهتزة تتمثل بما يلي :

$$U = U_0 + A (r - r_0)^2 + B (r - r_0)^3 + \dots + \qquad \dots (4-85)$$

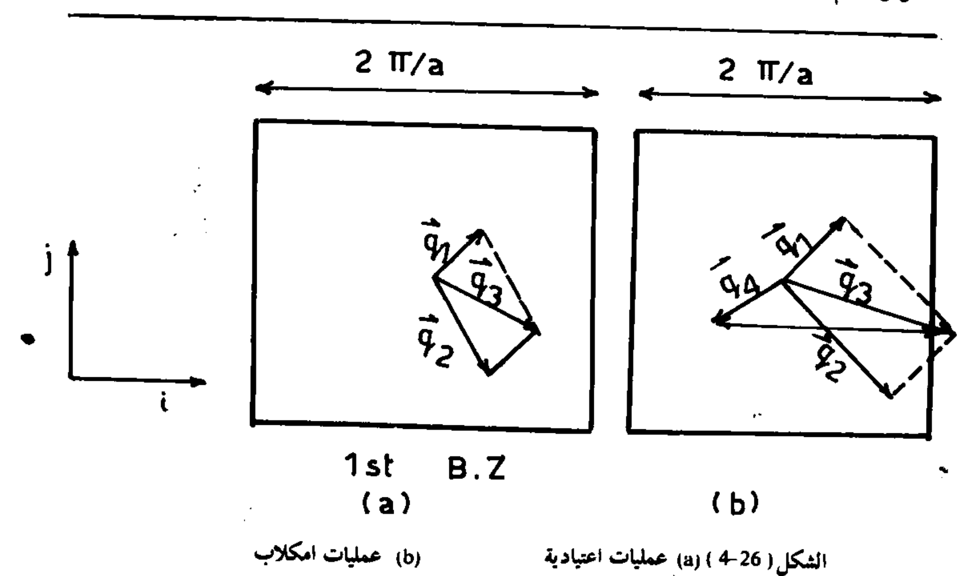
ان المراتب العليا في هذه المعادلة هي الحدود اللا توافقية والتي تسبب عملية التفاعل بين الفونونات . ولذا سيكون معدل المسار الحر للفونونات محدوداً في حالة عدم وجود التاثيرات اللا توافقية فيكون من غير الممكن تهدئة (thermalize) طيف الفونونات المتهيجة .

ان مفهوم دور التاثرات اللا توافقية على عملية التصادم بين الفونونات من المفاهيم الصعبة في فيزياء الحالة الصلبة وخارج حدود هذا الكتاب ولكن من الملاحظات الاولية ترى انه من المعقول ان l تتغير مع $\frac{1}{T}$ عند درجات الحرارة العالية . عند درجة حرارة ديباي θ_D جميع الفونونات تتهيج ويتناسب عددها مع درجة الحرارة في هذا المدى من درجات الحرارة العالية . نجد ان $K_l . l$ تعتمد على درجة الحرارة وان C_v تبقى ثابتة ولا تعتمد على درجة الحرارة .

لنرجع الان الى تصادم الفونونات ونفترض ان فونونين احدهما بمتجه الموجي $\vec{q}_1$ والاخر بالمتجه الموجي $\vec{q}_2$ تصادما وتولد فونون ثالث جديد بمتجه موجي $\vec{q}_3$. واحتمالية نوع التصادم تحدد بقيمة الحدود االلا توافقية في المعادلة (4-85)
ان الفونون المتولد يخضع لقانون حفظ الزخم وفق $\vec{q}_1 + \vec{q}_2 = \vec{q}_3$

بالرغم من ان $\vec{q}_2 , \vec{q}_1$ تقعان ضمن منطقة بريليون الأولى فان $\vec{q}_3$ قد لا تقع ضمن هذه المنطقة .
اذا بقي $\vec{q}_3$ ضمن منطقة بريليون الاولى فان الزخم بعد وقبل التصادم يبقى متساوياً وهذه العملية لا تؤثر على المقاومة الحرارية ، وبصورة عامة لا تؤثر على جريان الفونونات وهذه تعرف بالعمليات الاعتيادية (الشكل 4-26a)

وعلى نقيض ذلك اذا كان المتجهان $\vec{q}_2 , \vec{q}_1$ كبيرين (وهذا يحدث عند درجات الحرارة العالية) فان $\vec{q}_3$ تتعدى حدود منطقة بريليون الاولى كما في الشكل (4-26b) ولكي تبقى $\vec{q}_3$ ضمن منطقة بريليون الاولى سيدخل عامل جديد اخر وهو متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ $\left(\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\, i \right)$ كما نلاحظ من الشكل (4-26) ان $\vec{q}_4 = \vec{q}_3 + \vec{G}$ وتكون باتجاه معاكس لكل من $\vec{q}_2 , \vec{q}_1$. ان هذه العملية تؤثر في تغير زخم الفونونات وكذلك هي المسؤولة عن تغيير معدل المسار الحر للفونون ثم التوصيلية الحرارية K_l .



الشكل (4-26) (a) عمليات اعتيادية (b) عمليات امكلاب

الاسئلة

4-1 بيّن من علاقة التفريق (4-10) ان سرعة المجموعة V_g تتضح بالعلاقة التالية

$$V_g = V_s \cos \frac{q_a}{2}$$

فسر هذه النتيجة عندما $q = 0$ و $q = \mp \frac{\pi}{a}$

4-2 بيّن ان معدل الطاقة للمتذبذب في بعد واحد عند التوازن الحراري هو $< E >= K_B T$ مستخدماً معادلة ماكسويل – بولتزمان

4-3 تتكون المجموعة من 10^{23} متذبذب توافقي بسيط وكل متذبذب له تردد $10^{13}HZ$. احسب معدل الطاقة $< E >$ للمجموعة عند درجات الحرارة 2000 K , 200 K , 2 K . ناقش اهمية الاجابة . ثم بين في اي مدى من الدرجات الحرارية يمكن ان تعامل المجموعة كلاسيكياً .

4-4 ماهي العوامل التي تحدد درجة حرارة ديباي θ_D للعنصر المعين ؟ جد θ_D للذهب من المعلومات التالية : الوزن الجزيئي للذهب 197 وكثافته $1.9 \times 10^4 Kg. m^{-3}$ وسرعة الصوت V_s فيه $2100mS^{-1}$ اذا علمت ان وزن الجزيئي للنحاس 63.5 وكثافته $8900Kg. m^{-3}$ وسرعة الصوت فيه هي $3800mS^{-1}$ ودرجة حرارة ديباي θ_D للنحاس 348°K (ملاحظة الذهب والنحاس لهما التركيب البلوري نفسه).

4-5 درجة حرارة ديباي لمادة KCl , NaCl ، واللتان لهما نفس التركيب البلوري ، هي 230K , 310°K على التوالي . السعة الحرارية لشبيكة KCl عند درجة حرارة 5°K هي $3.8 \times 10^{-2} mol. K^{-1}$ جد السعة الحرارية لشبيكة NaCl في درجة حرارة 5°K . وكذلك لـ KCl عند درجة الحرارة 2 K

4-6 درجة حرارة ديباي θ_D للماس هي 2000 K وكثافته $3500Kg. m^{-3}$ والوزن الجزيئي للماس هي 12 والمسافة البينية (a_0) للذرات 0.5 nm . جد سرعة الصوت في الماس ثم طول الموجي للفونون عند درجة 300°K

4-7 جد معدل مسار الحر (l) للفونونات في مادة جرمانيوم عند درجة الحـــرارة $300^\circ K$ ، مستخدماً المعلومات التالية . التوصيلية الحرارية $80 W. Cm^{-1} K^{-1}$ و $\theta_D = 360^\circ K$ والوزن الذري 72.6 والـكثافة $5500 Kg. m^{-3}$ ومعدل سرعة الصوت فيها هي $4800 mS^{-1}$ (مع الافتراض بان الحرارة تنتقل بواسطة الفونونات) .

4-ه جد الاهمية النسبية لعملية امكلاب U - process الى التوصيلية الحرارية عند درجـــة $20^\circ K , 100^\circ K$. اذا علمت ان درجـــة حرارة ديبـــاي $\theta_D = 300^\circ K$ لهذه المادة :

الفصل الخامس

الألكترونات الحرة في المعادن

5-1 المقدمة

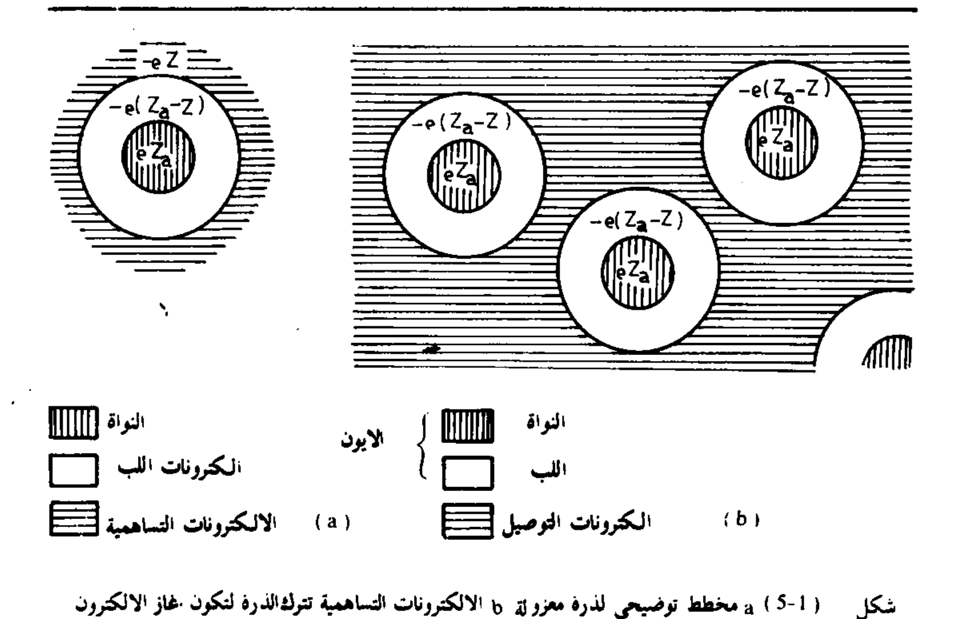
لايمكن اعطاء تعريف واحد للمعدن وذلك لاختلاف المعنى باختلاف الباحثين . حيث ان المعدن من وجهة نظر الفيزياوي هو المادة التي تتميز بسطح فيرمي (Fermi surface) . ولكن المعادن ربما تكون على شكل سائل (liquid) او صلب (solid) بلورية (crystalline) او عشوائية (amorphous) وعليه لايوجد تعريف واحد وشامل ومقبول من قبل جميع الباحثين . ان المختصين بهندسة المعادن . مثلاً . يؤكدون على ان المعادن هي المواد التي تتميز بقابليتها العالية للطرق والسحب والتوصيل وعلماء المعادن . من ناحية اخرى . ينظرون للمعادن بانها المواد التي تستخرج من قشرة الارض وتنقى وتعامل ميكانيكياً وحرارياً لتغيّر خواصها الحجمية . اما بالنسبة للكيماويين . فان المعادن هي العناصر التي تتميز بميولها للتفاعل مع العناصر الاخرى وتشغل اعمدة خاصة في الجدول الدوري . ان الفيزيائيين يؤكدون على المنشأ الذري للمعادن ويحاولون فهم خواصها بدلالة المتغيرات الذرية (atomic parameters)

ان الخواص الشائعة للمعادن تتمثل بتوصيلتها الـكهربائية والحرارية العالية حيث المقاومة النوعية الـكهربائية (electrical resistivity) للمعادن وعند درجة حرارة الغرفة تتراوح بين 1.5 مايكرواوم – سم للفضـــة (موصل جيد) و 144 مايكرواوم – سم للبلوتونيوم (موصل رديء) ولـكن توصيلية الاخيرهي احسن بـ 10^5 مرة من توصيلة اشباه الموصلات (semiconductors) . مثل السيلـكـــون والجرمانيوم . ان المقاومة النوعية في المعادن تزداد بزيادة درجة الحرارة بينما تظهر المقاومة النوعية في اشباه الموصلات سلوكاً معاكساً . حيث تنخفض المقاومة النوعية بارتفاع درجة الحرارة . يمكن تفسير ذلك باستخدام نظرية الحزم band theory (الفصـــل السادس) حيث يزداد عدد الالـكترونات التي تنتقل من الحزمة التساهمية valence band الى حزمة التوصيل بارتفاع درجة الحرارة conduction band وبذلك يزداد التيار .

5-2 نموذج درود Drude Model

ان اكتشاف الالـكترون (عام 1897) من قبل العالم ثومسن J. J. Thomson كان له التأثير الـكبير في تفسير نظرية تركيب المادة وعملية التوصيل الـكهربائي في المعادن . بعد مرور ثلاث سنوات على اكتشاف الالـكترون . وضع درود نظريته للتوصيل الحراري والـكهربائي للمعادن باستخدام النظرية الحركية للغازات .

في هذا النموذج . عندما تقترب ذرات العناصر المعدنية بعضها من بعضها الآخر لتكوّن المعدن . فان الـكتروناتها التساهمية (valence electrons) تتجول بصورة حرة خلال المعدن بينما الايونات المعدنية تلعب دور الجسيمات الموجبة الراسخة (غير المتنقلة) كما هوموضح في الشكل (5-1) . نفترض ذرة معزولة (isolated atom) في عنصر معدني شحنة نواتها تساوي eZ_a . حيث Z_a تمثل العدد الذري و e قيمة الشحنة الالـكترونية وتساوي 1.6×10^{-19} كولوم . يحيط هذه النواة عدد من الالـكترونات يساوي Z_a وشحنتها الـكلية ($-eZ_a$) . هناك عدد قليل من هذه الالـكترونات ويساوي Z تكون مقيدة بصورة ضعيفة نسبياً للنواة وتمثل الالـكترونات التساهمية valence electrons . اما الالـكترونات المتبقية ($Z_a - Z$) فتكون مرتبطة بالنواة بصورة كبيرة نسبياً ولاتلعب دوراً مهماً في التفاعلات الـكيمياوية ويطلق عليها الـكترونات اللب (core electrons) . وعندما تقترب الذرات المعزولة من



شكل (5-1) a مخطط توضيحي لذرة معزولة b الالكترونات التساهمية تترك الذرة لتكون غاز الالكترون

بعضها لتكوين المادة الصلبة فان الـكترونات اللب تبقى مقيدة بالنواة لتكوّن الآيون المعدني metallic ion بينما تتجول الالـكترونات التساهمية بصورة حرة بعيداً عن الذرات التي انفصلت عنها . في المعادن يطلق على هذه الالـكترونات بالـكترونات التوصيل (conduction electrons)

يمكن ورود النظرية الحركية للغازات لتطبيقها على « غاز » الـكترونات التوصيل التي كتلتها m والتي تتحرك بصورة طليقة داخل المعدن . ويمكن حساب كثافة هـذه الالـكترونات كما يلي :

ان العناصر المعدنية تحتوي على $0{\cdot}6022 \times 10^{24}$ ذرة لـكل مول (اي عـدد افكادرو Avogadro's number) وتحتوي على ρ_m / A مول لـكل سم^3 حيث ρ_m تمثل كثافة الـكتلة (غم / سم^3) و A الـكتلة الذرية (atomic mass) . لما كانت كل ذرة تساهم بـ Z من الالـكترونات . فان عدد الالـكترونات (n) لـكل سم^3 يساوي :

$$n = N / V$$

$$= 0{\cdot}6022 \times 10^{24} \; \frac{Z\rho_m}{A} \qquad \ldots (5\text{-}1)$$

ان القيمة النموذجية لـ n تساوي 10^{22} الـكترون لـكل سم٣، حيث تتغير هذه القيمة من عنصر الى آخر وتنحصر بين 0.9×10^{22} للسيزيوم و 24.7×10^{22} للبرليوم كما هو موضح في الجدول (1-5). ان r_s في الجدول (1-5) تمثل قطر كرة حجمها يساوي الحجم V لـكل الـكترون توصيل ، اي

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4\pi r_s^3}{3} \qquad \dots (5-2)$$

وبذلك فان :

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$$

حيث r_s تمثل نصف قطر الـكترون التوصيل .

ان اهم الفرضيات التي استخدمها درود في نظريته هي :

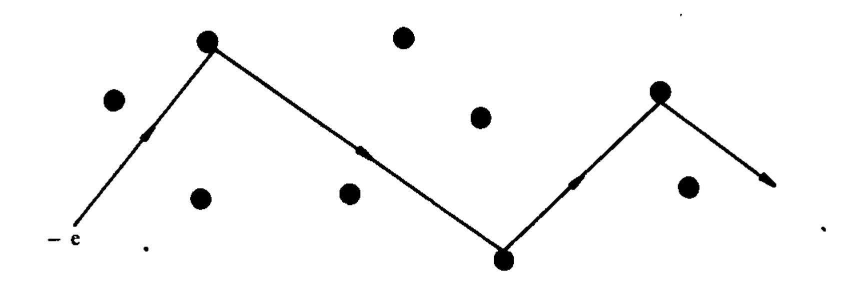
1 - تم اهمال التصادمات بين الالـكترونات بعضها مع بعضها الآخر وبين الالـكترونات والايونات ، وعليه في حالة عدم وجود مجال كهرومغناطيسي خارجي فان الالـكترونات تتحرك بصورة منتظمة وبخط مستقيم . اما في حالة وجود المجال الخارجي فان الالـكترون يتحرك تبعاً لقوانين نيوتن في الحركة .

2 - ان عملية تصادم الالـكترونات في نظرية درود ، تؤدي الى تغير سرعة الالـكترونات وبصورة فجائية (كما هو الحال في النظرية الحركية للغازات) . لقد عزى درود هذا التغير في سرعة الالـكترون الى ارتداده من الايونات (بدلاً من تصادم الالـكترونات بعضها مع بعضها الآخر وهي عملية التصادم المتغلبة في الغازات الاعتيادية) . ولابد من الاشارة الى ان عملية تصادم الالـكترونات فيما بينها تشكل عملية من اهم عمليات التصادم في المعادن . ان الشكل (2-5) يوضح مسار الـكترون التوصيل بعد ارتداده من الايونات الموجبة وحسب نموذج درود .

3 - افترض درود ان الالـكترون يعاني تصادماً (اي تغيراً مفاجئاً في سرعته) وباحتمالية لوحدة الزمن تساوي $1/\tau$. وهذا يعني ان احتمالية اي الـكترون لـكي يتصادم في فترة قصيرة من الزمن dt تساوي dt/τ . ان الزمن τ يسمى بفترة الاسترخاء (relaxation time) اوفترة التصادم ويعرف بمعدل الزمن الذي

الجدول (5-1) كثافة الالـكترونات الحرة ونصف قطر الـكترون التوصيل لبعض العناصر المختارة و a_0 يمثل نصف قطر بور .

ELEMENT	Z	$n\ (10^{22}/cm^3)$	$r_s\ (A^\circ)$	r_s / a_0
Li (78 K)	1	4·70	1·72	3·25
Na(5 K)	1	2·65	2·08	3·93
K (5 K)	1	1·40	2·57	4·86
Rb(5 K)	1	1·15	2·75	5·20
Cs (5 K)	1	0·91	2·98	5·62
Cu	1	8·47	1·41	2·67
Ag	1	5·86	1·60	3·02
Au	1	5·90	1·59	3·01
Be	2	24·7	0·99	1·87
Mg	2	8·61	1·41	2·66
Ca	2	4·61	1·73	3·27
Sr	2	3·55	1·89	3·57
Ba	2	3·15	1·96	3·71
Nb	1	5·56	1·63	3·07
Fe	2	17·0	1·12	2·12
Mn (α)	2	16·5	1·13	2·14
Zn	2	13·2	1·22	2·30
Cd	2	9·27	1·37	2·59
Hg (78 K)	2	8·65	1·40	2·65
Al	3	18·1	1·10	2·07
Ga	3	15·4	1·16	2·19
In	3	11·5	1·27	2·41
Tl	3	10·5	1·31	2·48
Sn	4	14·8	1·17	2·22
Pb	4	13·2	1·22	2·30
Bi	5	14·1	1·19	2·25
Sb	5	16·5	1·13	2·14



الشكل (5-2) مسار الكترون التوصيل بعد ارتداده من الايونات

يحتاجه الالـكترون لقطع المسافة بين تصادمين متعاقبين ويسمى ايضاً بمعدل الزمن الحر (mean free time) ويلعب دوراً مهماً في عملية التوصيل للمعادن . ومن ذلك نستنتج ان الالـكترون يمضي فترة زمنية τ قبل ان يتصادم مرة اخرى. وحسب نظرية درود البسيطة نفترض ان τ لاتعتمد على موقع وسرعة الالـكترون

4 - افترض ان الالـكترونات تحقق التوازن الحراري (thermal equilibrium) عن طريق التصادمات . اي ان سرعة الالـكترون بعد التصادم مباشرةً لاتساوي سرعته قبل التصادم ولكن الالـكترون بعد التصادم يتحرك بصورة عشوائيــة وبسرعة تتناسب مع درجة الحرارة عند منطقة الحدث (اي منطقة التصادم) . ان ارتفاع درجة حرارة منطقة التصادم تؤدي الى زيادة سرعة الالـكترون حال تركه هذه المنطقة .

5-3 التوصيلية الكهربائية للتيار المستمر في المعادن

حسب قانون اوم (Ohm's law) . فان التيار I المار في سلك معدني يتناسب مع فرق الجهد V خلال السلك . اي

$$V = IR \qquad \dots (5\text{-}3)$$

حيث R هي مقاومة السلك والتي تعتمد على طول ومساحة مقطع السلك ولاتعتمد على كمية التيار وفرق الجهد . ان المقاومة النوعية ρ تسمى بثابت التناسب بين المجـال

الـكهربائي $\vec{E}$ عند نقطة في المعدن وكثافة التيار current density $\vec{J}$ في تلك النقطة ، وعليه .

$$\vec{E} = \rho \vec{J} \qquad \ldots (5\text{-}4)$$

حيث $\vec{J}$ كمية متجهة باتجاه موازٍ لتدفق الشحنة ومقدارها يساوي كمية الشحنة لوحدة الزمن والتي تقطع وحدة المساحة باتجاه عمودي لاتجاه التدفق . اذا مرَّ تيار I منتظم خلال سلك طوله L ومساحة مقطعه A فان كثافة التيار $J = I / A$.
ولما كان فرق الجهد خلال السلك $V = EL$ ، فان المعادلة (5-4) تاخذ الصيغة التالية :

$$V = I\rho L / A$$

و

$$R = \rho \frac{L}{A} \qquad \ldots (5\text{-}5)$$

واذا كان هناك n من الالـكترونات في وحدة الحجم وجميعها تتحرك بسرعة $\vec{v}$ فان كثافة التيار الناتجة عن هذه الالـكترونات تكون باتجاه $\vec{v}$ ايضاً . واذا قطعت الالـكترونات مسافة vdt باتجاه $\vec{v}$ وفي زمن قدره dt فـــان هنـــاك $n (vdt) A$ من الالـكترونات تقطع مساحة قدرها A عمودية على اتجاه تدفق التيار .
ولما كان كل الـكترون يحمل شحنة قدرها $(- e)$. فان الشحنة الـكلية التي تجتاز المساحة A في زمن قدره dt تساوي $- nevAdt$ وبذلـــك فـــان :

$$\vec{J} = - ne\vec{v} \qquad \ldots (5\text{-}6)$$

ان الالـكترونات في اي نقطة من المعدن تتحرك باتجاهات مختلفة وبطاقات حرارية مختلفة . وعليه فان المعادلة (5-6) تمثل المحصلة النهائية لـكثافة التيار الـكهربائي و $\vec{v}$ معدل سرعة الالـكترونات . في حالة عدم وجود مجال كهربائي خارجي . فان الالـكترونات تتحرك بجميع الاتجاهات وان محصلة $\vec{v}$ تساوي صفراً . اي ان كثافة التيار الـكهربائي الـكلية هي الاخرى تساوي صفراً . وعند تسليط مجال كهربائي خارجي $\vec{E}$ فان الالـكترونات داخل المعدن سوف تتأثر بهذا المجال وتكتسب سرعة مما تجعـــل الالـكترونات تنساق عكـــس اتجاه المجال الـــكهربائـــي (لان الالـكترونات لها شحنة سالبة) . ويمكن حساب معدل سرعة الانسياق بالطريقة التالية :

اذا افترضنا ان سرعة الالـكترون تساوي v_0 قبل التصادم ، فان السرعة تصبح v_0 مضافاً اليها سرعة الانسياق والتي تساوي $-eEt/m$ بعد مرور زمن قدره t ، حيث m هي كتة الالـكترون المستقر.

لقد افترضنا سابقاً بان الالـكترونات تتحرك باتجاهات عشوائية بعد التصادم وعليه فان v_0 لاتضاف الى معدل سرعة الالـكترون والتي تساوي $-eEt/m$ فقط . ان معدل الزمن t هوزمن الاسترخاء τ ، وبذلك

$$\vec{V}_{avg} = -\frac{e\vec{E}\tau}{m}$$

$$\vec{J} = -ne\left(-\frac{e\vec{E}\tau}{m}\right)$$

وعليه

$$\vec{J} = \left(\frac{ne^2\tau}{m}\right)\vec{E} \qquad \ldots (5-7)$$

يمكن كتابة المعادلة (5-7) بدلالة التوصيلية (σ) والتي تساوي $\left(\frac{1}{\rho}\right)$

$$\vec{J} = \sigma\vec{E}$$

حيث

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \qquad \ldots (5-8)$$

ان العلاقة التي تربط بين $\vec{E}, \vec{J}$ هي علاقة خطية ومنها يمكن تقدير قيمة التوصيلية σ بدلالة المقادير المعروفة قيمها (m, e, n) . من المعادلة (5-8) ومن الحسابات العملية للمقاومة النوعيـة ρ ، يمكن ايجاد قيمة τ حيث :

$$\tau = \frac{m}{\rho ne^2} \qquad \ldots (5-9)$$

ان الجدول (5-2) يوضح قيم ρ لعدد من المعادن عند درجات حرارية مختلفة ويتضح ان المقاومة النوعية تعتمد بصورة كبيرة على درجات الحرارة . ويمكن كتابة المعادلة (5-9) بالصيغة التالية :

$$\tau = \left(\frac{0{\cdot}22}{\rho}\right)\left(\frac{r_s}{a_0}\right)^3 \times 10^{-14}\ \text{sec.} \qquad \ldots (5-10)$$

الجدول (2–5) المقاومة النوعية لبعض العناصر المختارة عند درجات حرارية مختلفة

ELEMENT	77K	273K	373K	$\frac{(\rho / T)_{373K}}{(\rho / T)_{273K}}$
Li	1·04	8·55	12·4	1·06
Na	0·8	4·2	Melted	
K	1·38	6·1	Melted	
Rb	2·2	11·0	Melted	
Cs	4·5	18·8	Melted	
Cu	0·2	1·56	2·24	1·05
Ag	0·3	1·51	2·13	1·03
Au	0·5	2·04	2·84	1·02
Be		2·8	5·3	1·39
Mg	0·62	3·9	5·6	1·05
Ca		3·43	5·0	1·07
Sr	7	23		
Ba	17	60		
Nb	3·0	15·2	19·2	0·92
Fe	0·66	8·9	14·7	1·21
Zn	1·1	5·5	7·8	1·04
Cd	1·6	6·8		
Hg.	5·8	Melted	Melted	
Al	0·3	2·45	3·55	1·06
Ga	2·75	13·6	Melted	
In	1·8	8·0	12·1	1·11
Tl	3·7	15	22·8	1·11
Sn	2·1	10·6	15·8	1·09
Pb	4·7	19·0	27·0	1·04
Bi	35	107	156	1·07
Sb	8	39	59	1·11

حيث ρ مقاسة بوحـدات مايكرو اوم - سـم و a_0 تمثل نصف قطـر بـور (Bohr radius) وتساوي $0{\cdot}529 \times 10^{-8}$ سم . ان الجدول (3-5) يوضح قيم τ عند درجات حرارية مختلفة . وعند درجة حرارة الغرفة تتراوح قيم τ بين $10^{-15} - 10^{-14}$ ثانية . وللتأكد من ان قيم τ في الجدول (3-5) مقبولة نوعا ما . لابد من ايجاد معدل المسار الحر للالكترون l والذي يساوي $v_0 t$. حيث v_0 معدل سرعة الالـكترون . حسب نموذج درود . يمكن حساب v_0 من العلاقة الـكلاسيكية :

$$\frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{3}{2} K_B T$$

حيث K_B ثابت بولتزمان و m كتلة الالـكترون وبذلك نجد ان قيمة v_0 بحدود 10^7 سم / ثانية في درجة حرارة الغرفة وان طول المسار الحر يتراوح بين 1-10 انكستروم وان هذه المسافة قريبة من المسافة بين الذرات . ان هذه النتيجة منسجمة مع نظرية درود حيث التصادم ناتج عن ارتداد الالـكترونات من الايونات الثقيلة الـكبيرة . ولـكن سنلاحظ لاحقاً ان سرعة الالـكترون v_0 لاتعتمد على درجة الحرارة وان طول المسار الحر في درجات الحرارة الواطئة يصل الى 10^3 انكستروم اي الف مرة اكبر من المسافة بين الايونات . عند تحضير عينة نقية من المعدن وخالية من الشوائب وعيوب البلورة وعند درجات حرارية واطئة فان طول المسار الحر يصل الى 1 سم (اي اكبر بمائة مليون مرة من المسافة بين الايونات) .

وهكذا يفشل نموذج درود الذي يفترض ارتداد الالـكترونات وذلك باصطدامها بالايونات .

5-4 المقاومة النوعية للمعادن

هناك نوعان اساسيان من عيوب البلورة يساهمان في زيادة المقاومة النوعية في المعادن :

1 - الاهتزازات الحرارية(thermal vibrations) للشبيكة والذي يمنع الذرات المكونة للبلورة من اتخاذ مواقعها الحقيقية في نفس الوقت .

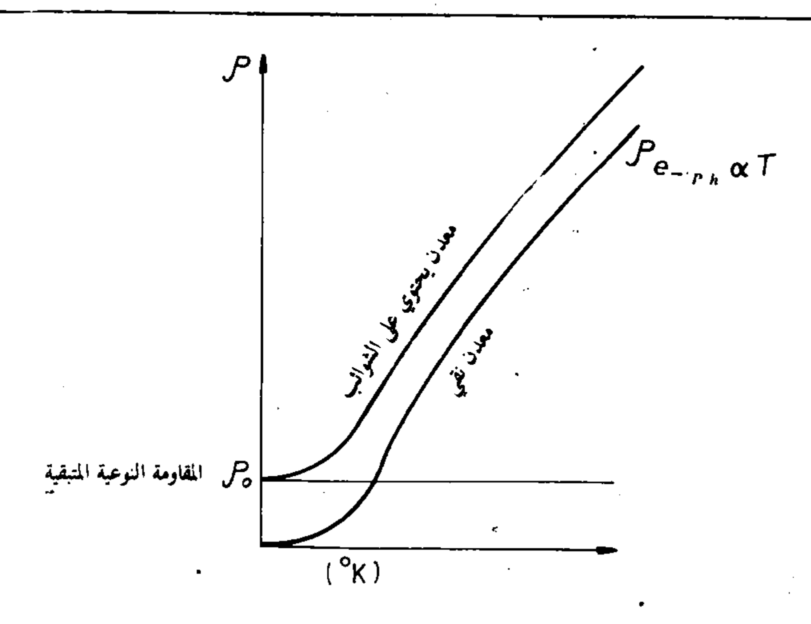
٢ - وجود الشوائب والعيوب النقطية (point defect) التي تؤثر على دورية (perioclicity) الشبيكة .

الجدول (5-3) زمن الاسترخاء (بوحدة 10^{-14} ثانية) حسب نموذج درود وعند درجات حرارية مختلفة .

ELEMENT	77K	273K	373K
Li	7·3	0·88	0·61
Na	17	3·2	
K	18	4·1	
Rb	14	2·8	
Cs	8·6	2·1	
Cu	21	2·7	1·9
Ag	20	4.0	2.8
Au	12	3.0	2.1
Be		0.51	0.27
Mg	6.7	1.1	0.74
Ca		2.2	1.5
Sr	1·4	0·44	
Ba	0·66	0·19	
Nb	2·1	0·42	0·33
Fe	3·2	0·24	0·14
Zn	2·4	0·49	0·34
Cd	2·4	0·56	
Hg	0·71		
Al	6·5	0·80	0·55
Ga	0·84	0·17	
In	1·7	0·38	0·25
Tl	0·91	0·22	0·15
Sn	1·1	0·23	0·15
Pb	0·57	0·14	0·099
Bi	0·072	0·023	0·016
Sb	0·27	0·055	0·036

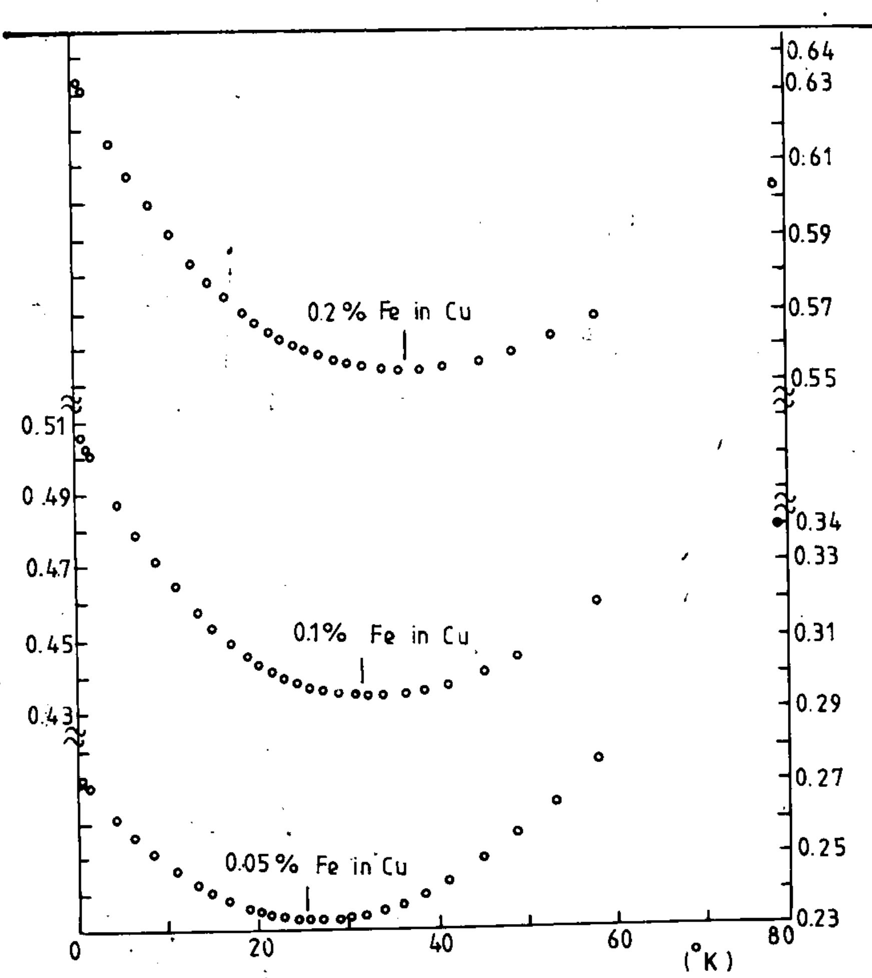
ان اهتزازات الشبيكة تقل بانخفاض درجات الحرارة وبذلك نتوقع ان مساهمتها في زيادة المقاومة النوعية تقل بانخفاض درجة الحرارة الى ان تصبح صفراً في درجة حرارة الصفر المطلق (0 K) أي يمكن اهمال تصادم الالكترون بالفونون عند تلك الدرجة الحرارية . ويرمز للمقاومة النوعية الناتجة عن تصادم الإلكترون بالفونون ρ_{e-ph} وتسمى بالمقاومة المثالية (ideal resistivity) . وعند ارتفاع درجة الحرارة يزداد تصادم الالكترون بالفونون وبذلك تزداد المقاومة النوعية للمعدن . وعندما ترتفع درجة الحرارة عالياً فان ρ_{e-ph} تكون ذات طابع متغلب في زيادة مقاومة المعدن وتتناسب خطياً مع درجة الحرارة وهذا يتفق مع النتائج العملية الموضحة في الشكل (5-3) . ان مساهمة الشوائب وعيوب البلورة الاخرى للمقاومة النوعية يرمز لها بـ ρ_0 وتسمى المقاومة النوعية التخلفية (residual resistivity) ولا تعتمد على درجة الحرارة ولكنها تزداد بزيادة تركيز الشوائب في المعدن . وعليه يمكن كتابة المقاومة النوعية الكلية للمعدن بالصيغة التالية :

$$\rho = \rho_0 + \rho_{e-ph} \qquad \dots (5\text{–}11)$$



الشكل (5-3) تغير المقاومة النوعية للمعادن مع درجة الحرارة

حيث المعادلة (5-11) تمثل قانون ماثيزين (Matthiessen) . ومن الشكل (5-3) نلاحظ ان قيمة ρ_0 تكون قليلة جداً عندما يكون المعدن نقياً وتكون كبيرة عندما يحتوي المعدن على شوائب كثيرة . ان قانون ماثيزين لاينطبق على جميع المعادن وذلك لحدوث بعض الظواهر الفيزياوية مثل ظاهرة كوندو (Kondo effect).
وباضافة شوائب الحديد Fe الى النحاس Cu فان المقاومة النوعية ρ عند درجات الحرارة الواطئة لاتظهر سلوكا مشابها للشكل (5-3) لان هناك قيمة دنيا للمقاومة النوعية عند درجات الحرارة الواطئة كما هو موضح في الشكل (5-4) . ان هذا



الشكل (5-4) ظاهرة كوندو : تغير المقاومة النسبية مع درجات الحرارة وظهور المقاومة الدنيا بأضافة الحديد الى النحاس وبتراكيز مختلفة حيث R_0 المقاومة عند درجة 0C

السلوك الشاذ يمكن تفسيره على اساس تصادم الالـكترون مع العزم المغناطيسي للشوائب المضافة للمعدن (ان الشوائب هي مواد مغناطيسية وعليه فان العلاقة بين المقاومة النوعية ρ ودرجة الحرارة T عند درجة حرارية واطئة لاتاخذ شكل العلاقة (5-11) ولـكن يجب استبدالها بمعادلة اكثر شمولية .

هناك طريقة بسيطة وسريعة لفحص نقاوة المادة من خلال قياس مقاومتها النوعية عند درجة حرارة الغرفة $\rho_{300\ K}$ ومقارنتها مع المقاومة النوعية التخلفية ρ_0 عند درجة حرارة سائل الهليوم .

أن النسبة ρ_{300} / ρ_0 يطلق عليها نسبة المقاومة التخلفية ويرمزلها RRR . (residual resistance ratio) . أن هذه النسبة تعتمد على طبيعة المادة تحت الدرس ومثال ذلك نموذج من مادة معدنية ذات نقاوة عالية مثل الالمنيوم والنحاس تصل قيمة نسبة مقاومتها التخلفية الى 200 وبزيادة نقاوة هذه المواد تزداد هذه النسبة الى 10^4 . أن هذه الدراسة هي طريقة مباشرة لمعرفة نقاوة المادة ولكن لايمكن استخدامها لمعرفة نوع الشوائب أوعيوب البلورة الاخرى :

5-5 التوصيلية الحرارية الالكترونية للمعادن :

Omar

عند تسخين نهايتي سلك معدني الى درجات حرارة مختلفة فأن الحرارة تنتقل من النهاية الساخنة الى النهاية الاقل سخونه وبذلك فأن كمية الطاقة الحرارية لوحدة المسافة ولوحدة الزمن تتناسب مع معدل الانحدار الحراري (temperature gudient) خلال السلك وفق المعادلة (4-80)

$$Q = \quad = \quad - K_l \frac{dT}{dX} \qquad \ldots (4\text{-}80)$$

حيث K_l التوصلية الحرارية (thermal conductivity) . أن التيار الحراري (thermal current) في المعدن يتنقل بواسطة الكترونات التوصيل . إن هذه النتيجة مبنية على اساس النتائج العملية ، حيث موصلية المعدن للحرارة هي احسن بكثيرمن موصلية العازل . وبذلك فأن التوصيل الحراري بواسطة الفونونات (الموجودة في المعادن والعوازل) هي اقل اهمية من التوصيل الحراري بواسطة الكترونات التوصيل والتي يقتصر وجودها في المعادن فقط . وعلية يمكن اهمال دور الفونونات في عملية انتقال الحرارة في المعادن .

لحساب التوصيلة الحرارية الالكترونية والتي يرمزلها κ_{el} (electronical thermal conductivity نستخدم العلاقة التالية :

$$\kappa_{el} = \frac{1}{3} lv C_v \qquad \dots (5\text{-}12)$$

حيث C_v الحرارة النوعية الالكترونية لوحدة الحجم و l معدل المسار الحر و v سرعة الالكترون . حسب نظرية درود أن التوصلية الكهربائية

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

وبدلالة المسار الحر فان

$$\sigma = \frac{ne^2 l}{mv} \qquad \dots (5\text{-}13)$$

من المعادلتين (5-12) و (5-13) نحصل على

$$\frac{\kappa_{el}}{\sigma} = \frac{\frac{1}{3} C_v mv^2}{ne^2} \qquad \dots (5\text{-}14)$$

أن درود استخدم النظرية الكلاسيكية (النظرية الحركية للغازات) في حساب الحرارة النوعية الالكترونية C_v ومعدل مربع السرعة . وبذلك

$$C_v = \frac{3}{2} n K_B$$

و

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{3}{2} K_B T$$

حيث K_B ثابت بولتزمان . بالتعويض عن C_v و v^2 في المعادلة (5-14) نحصل على

$$\frac{\kappa_{el}}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{K_B}{e} \right)^2 T \qquad \dots (5\text{-}15)$$

أن المعادلة (5-15) تشمل قانون وايدمان – فرانز Wiedemann Franz) يمكننا ايضاً كتابة المعادلة (5-15) بالصيغة التالية :

$$L = \frac{\kappa_{el}}{\sigma T} = \frac{3}{2} \left(\frac{K_B}{e} \right)^2 = 1{\cdot}11 \times 10^{-8}\ W\Omega\ K^{-2} \qquad (5\text{-}16)$$

حيث L ثابت لورنز وقيمتها هنا تساوي نصف القيم النموذجية الموضحة في الجدول (5-4) . أن الخطأ الناتج في المعادلة(16 - 5) هو نتيجة افتراض أن مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية يساوي $\frac{3}{2} n K_B$ والتي لاتتفق مع الناتج التجريبية . لقد وجد عملياً انه لاتوجد أي مساهمة لالكترونات التوصيل للحرارة النوعية في درجات حرارة الغرفة .وبذلك لايمكن استخدام النظرية الكلاسيكية على الالكترونات الغازية .

الجدول (4 - 5) القيم العملية للتوصيلية الحرارية الالكترونية ولثابت لورنز لبعض العناصر المختارة .

	273 K		373 K	
ELEMENT	κ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/k^2)	κ (watt/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (watt-ohm/K^2)
Li	0. 71	2.22×10^{-8}	0. 73	2.43×10^{-8}
Na	1. 38	2. 21		
K	1. 0	2. 23		
Rb	0. 6	2. 42		
Cu	3. 85	2. 20	3. 82	2. 29
Ag	4. 18	2. 31	4. 17	2. 38
Au	3. 1	2. 32	3. 1	2. 36
Be	2. 3	2. 36	1. 7	2. 42
Mg	1. 5	2. 14	1. 5	2. 25
Nb	0. 52	2. 90	0. 54	2. 78
Fe	0. 80	2. 61	0. 73	2. 88
Zn	1. 13	2. 28	1. 1	2. 30
Cd	1. 0	2. 49	1. 0	
Al	2. 38	2. 14	2. 30	2. 19
In	0. 88	2. 58	0. 80	2. 60
Tl	0. 5	2. 75	0. 45	2. 75
Sn	0. 64	2. 48	0. 60	2. 54
Pb	0. 38	2. 64	0. 35	2. 53
Bi	0. 09	3. 53	0. 08	3. 35
Sb	0. 18	2. 57	0. 17	2. 69

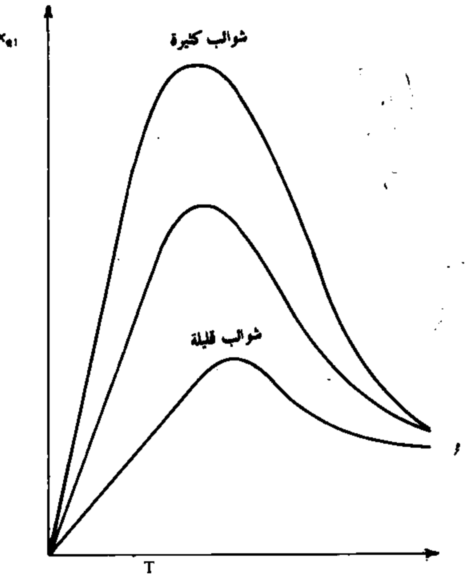
ان القيمة الحقيقية لمساهمة الالكترونات للحرارة النوعية تساوي

$$\frac{\pi^2}{2}\left(\frac{K_B T}{\varepsilon_f}\right) n K_B$$

(لاحظ البند 8-5) حيث ε_f هي طاقة فيرمي وان الحرارة النوعية هي أصغر من القيمة الكلاسيكية بمقدار $K_B T / \varepsilon_f$. وان القيمة الحقيقية لمربع السرعة v^2 هي ليست لمربع السرعة الحرارية الكلاسيكية للالكترون $K_B T / m$ ولكن $V_f^2 = 2\varepsilon_f / m$ وهي اكبر من القيمة الكلاسيكية بمقدار $\varepsilon_f / K_B T$. وبالتعويض عن القيم الحقيقية لـ C_r و v^2 في المعادلة (5-14) نحصل على

$$\frac{K_{el}}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{K_B}{e}\right)^2 = 2{\cdot}44 \times 10^{-8}\ W\,\Omega / K^2 \qquad ..(5\text{-}17)$$

أن هذه القيمة مطابقة لقيمة L في الجدول (4-5) . الشكل (5-5) يوضح تغير التوصلية الحرارية مع درجات الحرارة لمعادن ذات نقاوة مختلفة كما يبين الشكل أن التوصيلية الحرارية تتناسب خطياً مع درجات الحرارة بعد أن تصل قيمة κ الى اقصى قيمة لها .



الشكل (5-5) التوصيلية الحرارية كدالة لدرجات الحرارة لمعادن ذات نقاوة مختلفة .

5-6 النظرية الكمية للالكترونات الحرة

بعد اكتشاف مبدأ الانفراد لباولي استطاع سمرفيلد(Summerfield) استخدام نفس مبدأ الكترونات الغاز الحرة في المعادن لحل المشاكل التي عانت منهانظرية درود. ان الاختلاف الرئيسي بين النظريتين هو ان النظرية الكلاسيكية لدرود اعتمدت سرعة الالكترونات على اساس توزيع ماكسويل بولتزمان (المعادلة34 – 4). اما النظريةالـكمية لسمرفليد فقد تبنت التوزيع الكمي لفيرمي – ديراك (المعادلة 35 – 4)وعليه لابد مـــن دراسة النظرية الكمية لانها تعالج سلوك الالكترونات الحرة في المعادن . ان الالكترونات هي جسيمات فيرمي ، ولذلك فانها تخضع لمبدأ الانفراد . وعليه فان توزيع طاقة غاز الالكترونات الحرة في المعدن يتبع احصاء فيرمي – ديراك ، حيث دالة فيرمي تأخـــذ الصيغة التالية :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \varepsilon_f)/K_B T} + 1} \qquad \ldots (5-18)$$

وهذه المعادلة تتفق مع مبدأ الانفراد ، حيث نجد عند درجة الصفر المطلق

$f(\varepsilon) = 1$ عندما $\varepsilon < \varepsilon_f$

و

$f(\varepsilon) = 0$ عندما $\varepsilon > \varepsilon_f$

و

$f(\varepsilon) = \frac{1}{2}$ عندما $\varepsilon = \varepsilon_f$

وعندما تزداد درجة الحرارة تتغير دالة فيرمي (دالة الاحتمالية) تدريجياً من واحد الى صفر (لاحظ الشكل 6 - 5) نستطيع حساب طاقة فيرمي لنموذج من معدن يحتوي على N من الالكترونات الحرة وذلك بملء مستويات الطاقة الدنيامن $\varepsilon = 0$ ولغاية $\varepsilon = \varepsilon_f$ المطلوب ايجادها . ان عدد الالكترونات التي تشغل مستوى معين من الطاقة ε يساوي عدد الحالات $g_{(\varepsilon)}$ عند مستوى الطاقة ε حيث كل حالة تستوعب الكتروناً واحداً فقط . ولذلك

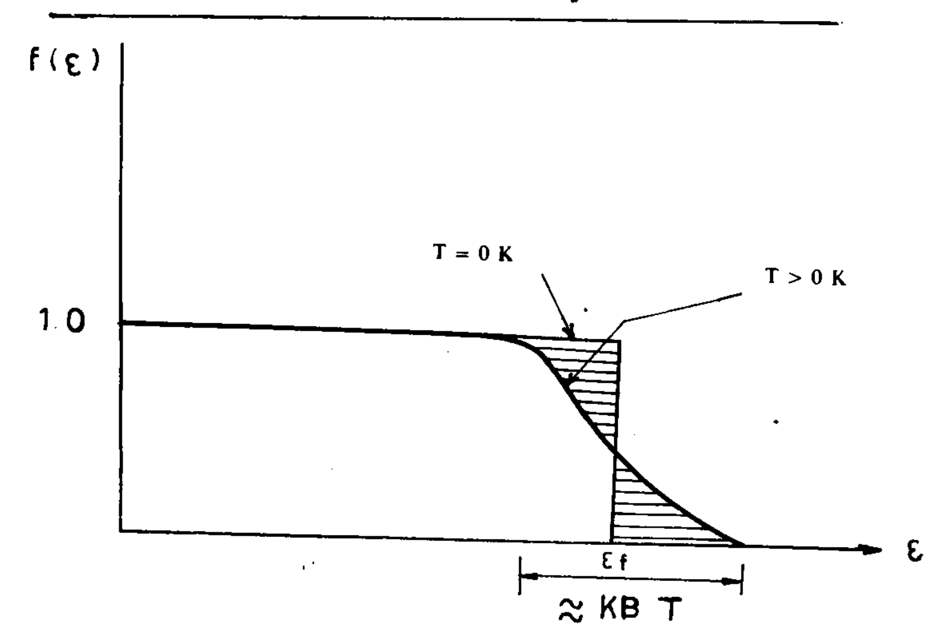
$$N = \int_0^{\varepsilon_f} g(\varepsilon)\, d\varepsilon \qquad \ldots (5-19)$$

حيث $g_{(\varepsilon)} d\varepsilon$ يمثل عدد الحالاتالمحصورةبين ε و $\varepsilon + d\varepsilon$ المتيسرة للالكترون .

يمكن استخدام نفس الطريقة لحالة فوتونات اشعاعات الجسم الآسود لايجاد عدد الحالات $g_{(\varepsilon)} d_{\varepsilon}$. هناك تشابه تام بين هاتين الحالتين حيث حالتا برم الالكترون $m_s = +\frac{1}{2}$ و $m_s = -\frac{1}{2}$ اللتان تؤديان الى تضاعف الحالة في فضاء الحالة (phase space) كتضاعف الحالات في فضاء الحالة لغاز الفوتونات نتيجة وجود اتجاهيين ممكنين لاستقطاب الفوتونات ، وبدلالة الزخم نجد ان

$$g_{(p)}\, dp = \frac{8\pi\, Vp^2\, dp}{h^3} \qquad \dots (5-20)$$

اما بالنسبة لالكترون غير نسبي (non relativistic) لدينا



الشكل (5-6) دالة فيرمي لتوزيع الالكترونات عند درجة الصفر المطلق ودرجة حرارة اعلى من الصفر

$$p^2 dp = (2m^3 \varepsilon)^{1/2} d\varepsilon \qquad \dots (5-21)$$

وعليه

$$g_{(\varepsilon)}\, d_{\varepsilon} = \frac{8\sqrt{2\pi}\; V\, m^{3/2}}{h^3}\, \varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon \qquad \dots (5-22)$$

وبالتعويض عن قيمة $g(\varepsilon)\,d\varepsilon$ من المعادلة (5 - 22) في المعادلة (5 - 19) نحصل على

$$N = \frac{8\sqrt{2\pi}\ V m^{3/2}}{h^3} \int_0^{\varepsilon_f} \varepsilon^{1/2}\, d\varepsilon$$

$$= \frac{16\sqrt{2\pi}\ V m^{3/2}}{3h^3}\, \varepsilon_f^{3/2}$$

ومنها

$$\varepsilon_f = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{\frac{2}{3}} \qquad \ldots (5 - 23)$$

حيث ε_f تمثل طاقة فيرمي . ان المقدار $\left(\frac{N}{V}\right)$ يمثل كثافة الالـكترونات الحرة في المعدن وعليه فان ε_f لا تعتمد على حجم النموذج تحت الدرس بل هومقدار ثابت لكل معدن. انه لمن المناسب ان نحسب معدل طاقة الالكترونات عند الصفر المطلق ولهذا نحسب اولا الطاقة الكلية للالكترونات (u) عند $T = 0K$ حيث

$$u = \int_0^{\varepsilon_f} \varepsilon\, n(\varepsilon)\, d\varepsilon$$

ولما كانت جميع الالكترونات عند $T = 0K$ تمتلك طاقات اقل من ε_f اوتساويها ، فعليه عند $T = 0K$ فان $e^{(\varepsilon - \varepsilon_f)/K_B T} = 0$
ولذلك

$$u = \frac{3N}{2}\, \varepsilon_f^{-\frac{3}{2}} \int_0^{\varepsilon_f} \varepsilon^{3/2}\, d\varepsilon$$

$$u = \frac{3}{5} N \varepsilon_f \qquad \ldots (5 - 24)$$

ان معدل طاقة الالكترونات $< \varepsilon >$ يساوي الطاقة الكلية مقسومة على عدد الالكترونات N الموجودة . اي :

$$< \varepsilon > = \frac{3}{5} \varepsilon_f \qquad \ldots (5 - 25)$$

5-7 خواص الحالة الدركية لغاز الالكترون

بما ان الالكترونات لا تتصادم مع بعضها الاخر (حسب نموذج الالكترونات الحرة) فيمكننا ايجاد الحالة الدركية لنظام متكون من N الكترون وذلك عن طريق حساب مستويات الطاقة لالكترون واحد منفرد في حجم V ثم يتم ملء هذه المستويات بالالكترونات بحيث نتبع مبدأ الانفراد لباولي والذي ينص على انه لا يمكن اشغال حالة كمية باكثر من الكترون واحد . يمكننا وصف الالكترون المنفرد بدلالة دالة الموجة $\Psi_{(r)}$. واذا لم يتصادم الالكترون فان دالة موجته التابعة لمستوى الطاقة ε تحقق معادلة شرودينجر غير المعتمدة على الزمن كما يلي :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) = \varepsilon\Psi(r) \qquad \ldots(5-26)$$

نفترض ان الالكترون محصور داخل مكعب طول ضلعه $L = V^{1/3}$. ان الشروط الحدودية لحل المعادلة (5 - 26) لحيز ذي . ثلاثة ابعاد هو :

$$\begin{aligned}\Psi(x,y,z+L) &= \Psi(x,y,z)\\ \Psi(x,y+L,z) &= \Psi(x,y,z)\\ \Psi(x+L,y,z) &= \Psi(x,y,z)\end{aligned} \qquad \ldots(5-27)$$

وكثيرا ماتسمى المعادلة (5 - 27) بشرط بورن – فون كارمان . وعليه

$$\Psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \ldots(5-28)$$

وان طاقة الالكترون

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \ldots(5-29)$$

حيث $\vec{k}$ متجه الموجة . لمعرفة اهمية المتجه $\vec{k}$ ، لابد من الاشارة بانه يمكن كتابة الزخم الخطي بدلالة المؤثر p (operator) في الميكانيك الكمي، حيث

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

يمكن تطبيق ذلك على المعادلة (28 - 5) لنحصل على

$$\vec{p}\,\Psi_k(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}}\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \hbar\vec{k}\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad \dots (5-30)$$

وعليه فان الموجة المستوية $\Psi_k(r)$ هي الدالة المسموحة للزخم الخطي وبذلك فان القيمة المسموحة للزخم هي ·

$$p = \hbar\vec{k} \qquad \dots (5-31)$$

اما سرعة الالكترون $\vec{v}$ فتساوي

$$\vec{v} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \qquad \dots (5-32)$$

يمكن كتابة متجه الموجة $\vec{k}$ بدلالة طول الموجة بحيث

$$\lambda = 2\pi/k$$

وتدعى هذه المعادلة بمعادلة دي برولي . نستنتج من المعادلة (26 - 5) ان هناك قيما مسموحة لـ k تحقق المعادلة (5.28) عندما

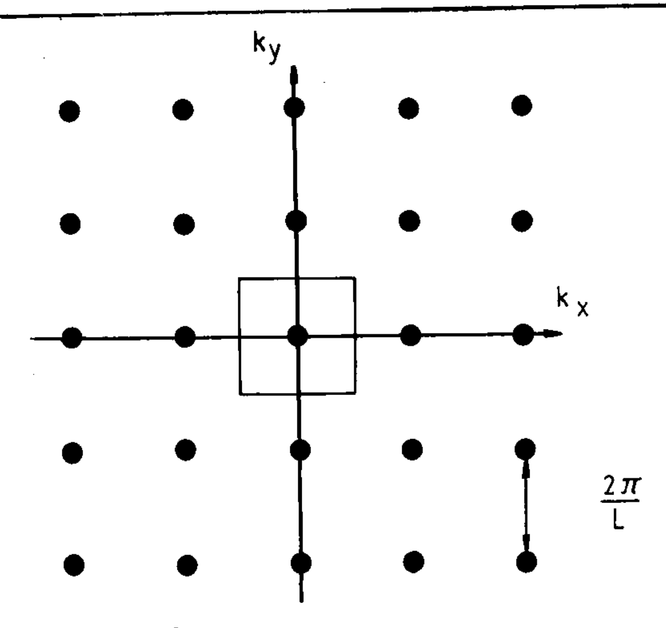
$$e^{ik_xL} = e^{ik_yL} = e^{ik_zL} = 1$$

لما كانت $e^{2\pi in} = 1$ حيث n عدد صحيح . فان قيم k المسموحة تاخذ الصيغ التالية :

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L},\ k_y = \frac{2\pi n_y}{L},\ k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \qquad \dots (5-33)$$

حيث n_z, n_y, n_x اعداد صحيحة . وعليه ففي فضاء ذي ثلاثة ابعاد k_z, k_y, k_x (فضاء k) تكون القيم المسموحة لمتجه الموجة هي مضاعفات $\frac{2\pi}{L}$ والشكل (7 - 5) يوضح فضاء k ذي بعدين . ان من اهم تطبيقات تكمم قيـم k (المعادلة (33 - 5) هو معرفة العدد المسموح لقيم k في فضاء k . واذا كان الحيز كبيرا جداً فان عدد النقاط المسموح بها يساوي حجم فضاء k ضمن الحيز مقسوما على حجـم فضاء k لكل نقطة ضمن القيم المسموحة لـ k . ان حجم الاخير يساوي $(2\pi/L)^3$ وكما هو في الشكل (7 - 5) . وبذلك فان حيز حجمه Ω في فضاء k يحتوي عـلى.

$$\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3} \qquad \dots (5-34)$$



الشكل (5-7) نقاط مرسومة بيعديين في فضاء k وبالشكل $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$ ، $k_y = \frac{2\pi n_y}{L}$ أن
المساحة لكل نقطة تساوي $(2\pi / L)^2$.

من القيم المسموحة لـ k . اي ان العدد المسموح لقيم k لوحدة الحجم في فضاء k، يساوي $\frac{V}{8\pi^3}$ ويعرف احيانا بكثافة المستويات في فضاء k .

في الحالة الدركية لنظام متكون من N من الالكترونات الحرة فأن المدارات المشغولة يمكن تمثيلها بنقاط داخل كرة في فضاء k . إن نصف قطر هذه الكرة يساوي k_f وحجمها (Ω) يساوي $4\pi k_f^3/3$.ومن المعادلة (34 - 5) فان العدد المسموح لقيم k ضمن هذه الكرة يساوي .

$$\left(\frac{4}{3} \pi k_f^3 \right) \left(\frac{V}{8\pi^3} \right) = \frac{k_f^3}{6\pi^2} V \qquad \dots (5-35)$$

وعلية فأن العدد الكلي للمدارات :

$$N = 2 \frac{k_f^3}{6\pi^2} V = \frac{k_f^3}{3\pi^2} V \qquad \dots (5-36)$$

أن العدد 2 في المعادلة (36-5) هو نتيجة وجود قيمتين للعدد الكلي البرمي m_s ($m_s = \pm 1/2$) لكل قيمة مسموحة لـ k . وبذلك لوكان لدينا N من الالكترونات في حجم V فأن الحالة الدركية لهذا النظام تتكون على اساس إشغال جميع المستويات المنفردة التي بها k اقل من k_f ونترك تلك المستويات التي لها k أكبر من k_f غير مشغولة . حيث

$$k_f = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$

أو

$$k_f = (3\pi^2 n)^{1/3} \qquad \dots (5-37)$$

حيث n تمثل الكثافة الالكترونية .

ان الكرة التي نصف قطرها k_f والتي تكون فيها جميع مستويات الالكترون الواحد مملوءة تسمى كرة فيرمي (Fermi sphere). ان سطح كرة فيرمي الذي يفصل بين المستويات المملوءة والمستويات الفارغة يسمى سطح فيرمي (Fermi surface) (سوف نلاحظ في الفصل السادس أن سطح فيرمي يشكل موضوعاً مهماً في النظرية الحديثة للمعادن وليس من الضروري أن يكون كروياً) . إن طاقة الالكترونات عند سطح فيرمي تساوي .

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \dots (5-38)$$

وزخم هذه الالكترونات .

$$p_f = \hbar k_f \qquad \dots (5-39)$$

أما سرعتها v_f فتساوي .

$$v_f = \frac{\hbar k_f}{m} \qquad \dots (5-40)$$

وتسمى سرعة فيرمي (Fermi velocity) وتلعب دوراً مهماً في نظرية المعادن بالمقارنة مع السرعة الحرارية $v = (3K_BT/m)^{1/2}$ وحسب النظرية الكلاسيكية . ونستطيع صياغة المعادلات اعلاه بدلالات عددية وذلك باستخدام المقدار r_s/a_0 (دون وحدات) والذي تتغير قيمة من 2 الى 6 في المعادن . من المعادلتين (2 - 5) و (37 - 5) نحصل على :

$$k_f = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s} = \frac{1.92}{r_s} \qquad \ldots (5-41)$$

أو

$$k_f = \frac{3.63}{r_s/a_0} \, A^{\circ -1} \qquad \ldots (5-42)$$

حيث a_0 تمثل نصف قطر بور . إن سرعة فيرمي v_f هـــي :

$$v_f = \left(\frac{\hbar}{m} \right) k_f = \frac{4.2}{r_s/a_0} \times 10^8 \text{ cm/sec.} \qquad \ldots (5-43)$$

من وجهة نظر الميكانيك الكلاسيكية ، فان هذه السرعة مدهشة لأن جميع الجسيمات في الغاز الكلاسكي عند درجة الصفر المطلق لها سرعة تساوي صفراً . حتى في درجات حرارة الغرفة فأن السرعة الحرارية للجسيمات الكلاسيكية التي تحمل كتلة الالكترونات تساوي ما يقارب 10^7 سم / ثانية . من المعادلة (42 - 5) وبالتعويض عن قيمة a_0 نحصل على

$$\varepsilon_f = \frac{50.1}{(r_s/a_0)^2} \, eV$$

وان الجدول (5 - 5) يوضح طاقة وسرعة ومتجه فيرمي لبعض المعادن يمكننا تعريف درجة حرارة فيرمي T_f (Fermi temperature) على انها

$$T_f = \frac{\varepsilon_f}{K_B} = \frac{58.2}{(r_s/a_0)^2} \times 10^4 \, ^\circ K \qquad \ldots (5-44)$$

وعلى نقيض ذلك ، فأن طاقة كل الكترون في الغاز الكلاسيكي تساوي $\frac{3}{2} K_B T$ وتساوي صفراً عندما $T = 0K^\circ$ بينما ترتفع قيمة هذه الطاقة لتساوي تقريبا درجة الحرارة المعطاة في المعادلة (45 - 5) عندما

$$T = \frac{2}{5} T_f \approx 10^4 \, ^\circ K \qquad \ldots (5-45)$$

إن كثافة الحالة $D(\varepsilon)$ (density of state) تعرف بعدد المدارات لوحدة الطاقة ويمكن ايجاد قيمتها من المعادلتين (36 - 5) , (38 - 5)

الجدول 5 - 5 طاقة فيرمي ودرجة حرارة فيرمي وسرعة فيرمي ومتجه موجة فيرمي لبعض العناصر.

ELEMENT	r_s/a_0	ε_f	T_f	k_f	v_f
Li	3. 25	4. 74 eV	5.51×10^4K	$1.12\times10^8\text{cm}^{-1}$	1.29×10^8cm/sec
Na	3. 93	3. 24	3. 77	0. 92	1. 07
K	4. 86	2. 12	2. 46	0. 75	0. 86
Rb	5. 20	1. 85	2. 15	0. 70	0. 81
Cs	5. 62	1. 59	1. 84	0. 65	0. 75
Cu	2. 67	7. 00	8. 16	1. 36	1. 57
Ag	3. 02	5. 49	6. 39	1. 20	1. 39
Au	3. 01	5. 53	6. 42	1. 21	1. 40
Be	1. 87	14. 3	16. 6	1. 94	2. 25
Mg	2. 66	7. 08	8. 23	1. 36	1. 58
Ca	3. 27	4. 69	5. 44	1. 11	1. 28
Sr	3. 57	3. 93	4. 57	1. 02	1. 18
Ba	3. 71	3. 64	4. 23	0. 98	1. 13
Nb	3. 07	5. 32	6. 18	1. 18	1. 37
Fe	2. 12	11. 1	13. 0	1. 71	1. 98
Mn	2. 14	10. 9	12. 7	1. 70	1. 96
Zn	2. 30	9. 47	11. 0	1. 58	1. 83
Cd	2. 59	7. 47	8. 68	1. 40	1. 62
Hg	2. 65	7. 13	8. 29	1. 37	1. 58
Al	2. 07	11. 7	13. 6	1. 75	2. 03
Ga	2. 19	10. 4	12. 1	1. 66	1. 92
In	2. 41	8. 63	10. 0	1. 51	1. 74
Tl	2. 48	8. 15	9. 46	1. 46	1. 69
Sn	2. 22	10. 2	11. 8	1. 64	1. 90
Pb	2. 30	9. 47	11. 0	1. 58	1. 83
Bi	2. 25	9. 90	11. 5	1. 61	1. 87
Sb	2. 14	10. 9	12. 7	1. 70	1. 96

حيــث

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{3/2} \qquad \ldots (5-46)$$

وبذلك فأن كثافة الحالة

$$D(\varepsilon) \equiv \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{1/2}$$

ويمكن التعبير عن كثافة الحالة بصيغة اخرى عندما نكتب المعادلة (5-46) بالشكل التالـــي :

$$\ln N = \frac{3}{2} \ln \varepsilon + \text{Constant}$$

$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}$$

وعلية

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{3N}{2\varepsilon} \qquad \ldots (5-47)$$

5-8 الحرارة النوعية الالكترونية للمعادن

إن من اهم تطبيقات الميكانيك الاحصائي لفيرمي وديراك هو مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية . عند ارتفاع درجة الحرارة فأن الالكترونات التي طاقتها قريبة من طاقة فيرمي ε_F تستطيع ان تغير حالتها وتتهيج وتكتسب طاقة $K_B T$ وبذلك تساهم في الحرارة النوعية . اما الجزء الاكبر من الالكترونات وبالاخص الالكترونات الداخلية فلا تتأثر بهذه الحرارة ولاتستطيع تغير حالاتها لان مداراتها تكون مشبعة . ولهذا فأن مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية تكون قليلة كما هي موضحة في الجزء المظلل في الشكل (5 - 6)

يمكننا تعريف الحرارة النوعية الالكترونية على النحو التالي :

$$C_{el} = \frac{du}{dT} \qquad \ldots (5-48)$$

حيث u تمثل الطاقة الكلية للالكترونات . أن الزيادة في الطاقة الكلية u لنظام متكون من N من الالكترونات عندما ترتفع درجة الحرارة من الصفر الى T هـي :

$$u = \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, f(\varepsilon) - \int_0^{\varepsilon_f} d\varepsilon\, \varepsilon\, D(\varepsilon) \qquad \ldots (5-49)$$

حيث $f(\varepsilon)$ هي دالة فيرمي – ديراك و $D(\varepsilon)$ كثافة الحالة . عند ضرب عدد المدارات N في طاقة فيرمي ، نحصل على

$$\varepsilon_f N = \varepsilon_f \int_0^\infty d\varepsilon\, D(\varepsilon)\, f(\varepsilon) \qquad \ldots (5-50)$$

وهذه المعادلة لاتعتمد على درجة الحرارة . وبتفاضل كل من المعادلتين (49 - 5) و (50 - 5) . نحصل على

$$C_{el} = \frac{\partial u}{\partial T} = \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon\, D(\varepsilon)\, \frac{\partial f}{\partial T}$$

$$0 = \varepsilon_f \frac{\partial N}{\partial T} = \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon_f\, D(\varepsilon)\, \frac{\partial f}{\partial T}$$

على التوالي :
ومنها نحصل على

$$C_{el} = \int_0^\infty d\varepsilon\, (\varepsilon - \varepsilon_f)\, D(\varepsilon)\, \frac{\partial f}{\partial T}$$

عند درجات الحرارة الواطئة $\left(\frac{K_B T}{\varepsilon_f} < 0.01\right)$ فأن المقدار $\partial f/\partial T$ يصبح كبيراً عندما تقترب ε من طاقة فيرمي ε_f وبذلك يمكن حساب $D(\varepsilon)$ عند طاقة فيرمي وتصبح كمية ثابتة ويمكن اخراجها خارج التكامل :

$$C_{el} = D(\varepsilon_f) \int_0^\infty d\varepsilon\, (\varepsilon - \varepsilon_f)\, \frac{\partial f}{\partial T}$$

ولكن

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_f}{K_B T^2} \quad \frac{e^{(\varepsilon - \varepsilon_f)/K_B T}}{\left(e^{(\varepsilon - \varepsilon_f)/K_B T} + 1\right)^2}$$

وعلية

$$C_{el} = \frac{1}{3} \pi^2 D(\varepsilon_f) K_B^2 T \qquad \dots (5 - 51)$$

وبالتعويض عن قيمة $D(\varepsilon_f)$ في المعادلة (47 - 5) نحصل على :

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N K_B \cdot \frac{K_B T}{\varepsilon_f} = \frac{1}{2} \pi^2 N K_B \frac{T}{T_f} = \gamma T \qquad \dots (5 - 52)$$

حيث γ تساوي $\frac{1}{2} \pi^2 \frac{NK_B}{T_f}$

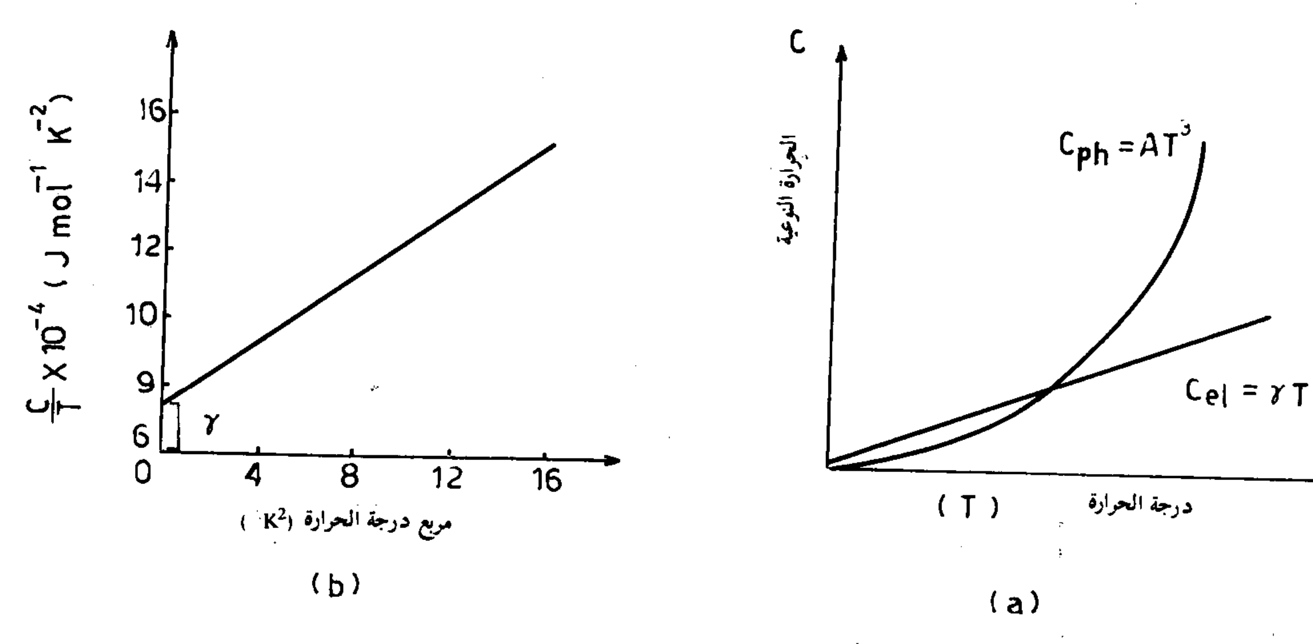
ولما كانت طاقة الالكترونات وحسب الميكانيك الكلاسيكي (توزيع ماكسويل – بولتزمان) تساوي $\frac{3}{2} NK_B T$ فأن الحرارة النوعية الناتجة عنها تساوي $\frac{3}{2} NK_B$ وبمقارنتها مع قيمة الحرارة النوعية في المعادلة (5.52) . نلاحظ أن مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية وحسب توزيع فيرمي – ديراك هي اقل بمقدار $\left(\frac{\pi^2}{3}\right)\left(\frac{K_B T}{\varepsilon_f}\right)$ من مساهمة الالكترونات حسب توزيع ماكسويل – بولتزمان . وبالاضافة الى ذلك نلاحظ أن الحرارة النوعية (المعادلة 52 - 5) تتناسب مع درجات الحرارة وقيمتها حوالي 10^{-2} عند درجة حرارة الغرفة وهذا ماتؤكده التجارب العملية وعلية فأن المعادلة 52 - 5) توضح سبب عدم مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية للمعادن في درجات الحرارة العالية لان مساهمة الفونونات تكون متغلبة . وبذلك فان الحرارة النوعية الكلية للمعادن تاخذ الصيغة التالية :

$$C = \gamma T + AT^3 \qquad \dots (5 - 53)$$

حيث γT مساهمة إلكترونات التوصيل للحرارة النوعية وهي ذات تأثير واضح عند درجات الحرارة الواطئة . اما مساهمة الفونونات (AT^3) فتكون ذات تأثير كبير عند درجات الحرارة العالية . يمكننا اعادة كتابة المعادلة (53 - 5) لتأخذ الشكل التالـي :

$$\frac{C}{T} = \gamma + AT^2 \qquad \dots (5 - 54)$$

وعند درجات الحرارة الواطئة يمكننا حساب مقدار مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية وذلك برسم $\frac{C}{T}$ كدالة لـ T^2 ومنها نحصل على خط مستقيم يقطع محور y عند قيمة γ كما هو موضح في الشكل (8 - 5) . أن تطابق النتائج العملية مع النتائج



الشكل (8-5) الحرارة النوعية للمعادن عند درجات الحرارة الواطئة
(a) عند درجات حرارة سائل الهليوم فأن الحرارة النوعية الالكترونية C_{el} تكون متغلبة على
مساهمة الفونونات للحرارة النوعية C_{ph} . (b) العلاقة بين C / T , T^2 للنحاس

النظرية (المعادلة 52 - 5) يوضح لنا مدى نجاح نظرية الالكترونات الحرة في تفسير مساهمة الالكترونات للحرارة النوعية . وقد استطاعت هذه النظرية ايضاً وبنجاح تفسير مساهمة الالكترونات في خاصية البارامغناطيسية (Paramagnetism) وكما سنوضح ذلك في الفصل التاسع .

5-9 ظاهرة هول في المعادن (Hall Effect)

ان الشكل (9 - 5) يوضح مخططاً لظاهرة هول (Hall Effect) في المعادن . عند تسليط مجال كهربائي E_x على شريحة معدنية تحمل تياراً كثافته J_x باتجاه طوله على محور x وبتسليط مجال مغناطيسي كثافة فيضه B عمودي على الشريط باتجاه محور z فان قوة لورنتس (Lorentz force) تعمل على حرف الالـكترونات باتجاه محور y السالب كما هو موضح في المعادلة (55 - 5) (لان سرعة انسياق الالـكترونات drift velocity تكون معاكسة لجريان التيـــار) .

$$\vec{F} = -e(\vec{v} \times \vec{B}) \qquad \dots (5-55)$$

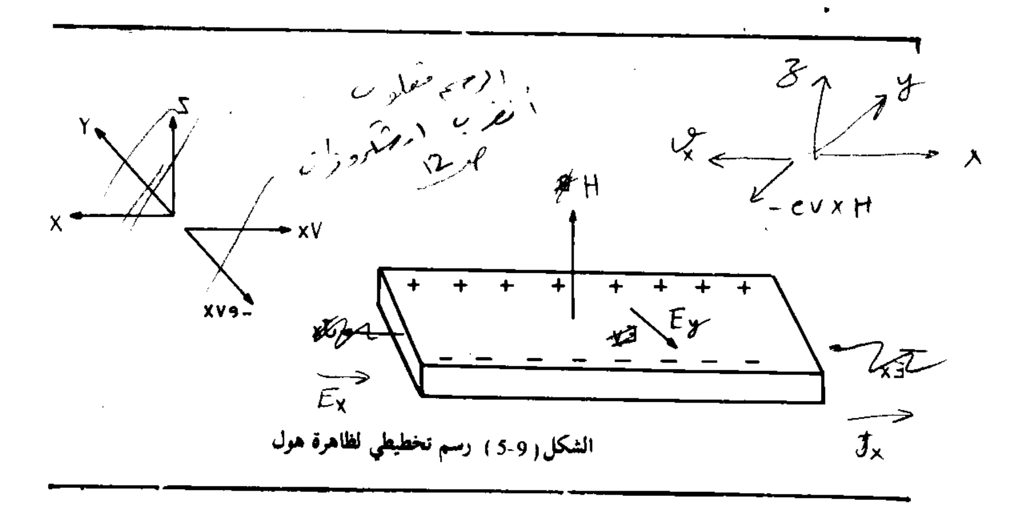
نتيجة لقوة لورنس فان الالـكترونات تتجمع عند الحافة السفلى وبذلك تصبح هذه الجهة من الشريحة مشحونة بالشحنة السالبة . وفي نفس الوقت تظهر شحنات موجبة عند الجهة العليا للشريحة وذلك للنقص الحاصل في الالـكترونات في تلك المنطقة . ان المجال المتولد نتيجة لهذه الشحنات (الموجبة والسالبة) يدعى بمجال هول (Hall field) ويعمل على تعادل قوة لورنس وبذلك فان التيار يمر فقط باتجاه محور x .

هناك ملاحظتان يجب الانتباه لهما :

١ — ان النسبة بين المجال الكهربائي المسلط على الشريحة (E_x) وكثافة التيار J_x تسمى بمقاومة المعدن للمغنطة (magneto resistance) ، اي :

$$\rho_{(B)} = \frac{E_x}{J_x} \qquad \dots (5-56)$$

وقد وجد هول ان هذه النسبة تعتمد على شدة المجال المغناطيسي المسلط .



الشكل (5-9) رسم تخطيطي لظاهرة هول

٢ – لما كان المجال E_y (مجال هول) يعمل على تعادل قوة لورنس فعليه نتوقع انه يتناسب مع كثافة الفيض المغناطيسي المسلط (B) وكثافة التيار المار في الشريحة J_x ، وعليه

$$R_H = \frac{E_y}{J_x B} \qquad \ldots (5-57)$$

ان ثابت التناسب R_H يدعى معامل هول (Hall coefficient) . ولما كان مجال هول باتجاه محور y السالب فان R_H يجب ان تكون سالبة . اما اذا كانت ناقلات الشحنة موجبة فان R_H تكون موجبة ايضاً . وغالباً ما تستخدم هذه الطريقة لمعرفة نوعية ناقلات الشحنة .

لحساب معامل هول ومقاومة المعدن للمغنطة . لابد من ايجاد كثافة التيار J_x و J_y في حالة وجود المجال الكهربائي وبالمركبات E_y , E_x وكذلك بوجود المجال المغناطيسي B باتجاه المحور z . وعليه فان القوة المؤثرة على الالكترون بوجود المجال الكهربائي والمجال المغناطيسي تساوي

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \qquad \ldots (5-58)$$

يمكن كتابة القوة المؤثرة على الالكترون بدلالة الزخم $\vec{p}$ وكما يلي :

$$\vec{F} = \left[\frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{\vec{p}}{\tau} \right] \qquad \ldots (5-59)$$

من المعادلتين(5-58)و(5-59)نحصل على

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\left[\vec{E} + \frac{\vec{p}}{m} \times \vec{B}\right] - \frac{\vec{p}}{\tau} \qquad \ldots(5-60)$$

وفي حالة التوازن (steady state)، فان التيارلا يعتمد على الزمن وعليه فان p_x و p_y يحققان المعادلة

$$0 = -eE_x - \omega_c p_y - \frac{P_x}{\tau}$$

$$0 = -eE_y + \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau} \qquad \ldots(5-61)$$

حيث

$$\omega_c = \frac{eB}{m}$$

وتسمى بالتردد المداري (السايكلتروني) (cycltron frequency) . وبضرب طرفي المعادلة(5–61)بـ($-ne\tau / m$) نحصل على

$$\sigma_0 E_x = \omega_c \tau J_y + J_x \qquad (5-62)$$

و

$$\sigma_0 E_y = -\omega_c \tau J_x + J_y \qquad \ldots(5-63)$$

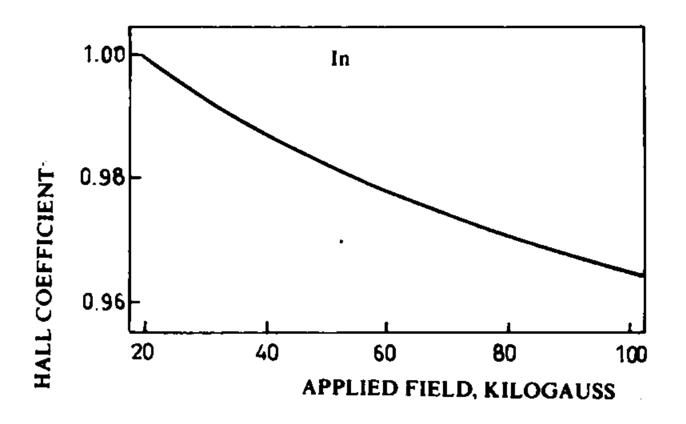
حيث $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$ تسمى التوصيلية الكهربائية للتيار المستمر في غياب المجال المغناطيسي. يمكن تحديد مجال هول E_y على اساس عدم مرور تيار مستعرض خلال الشريحة باتجاه محور y حيث يمر التيار باتجاه محور x فقط . وعندما نعوض عن قيمة $J_y = 0$ في المعادلة (5–62) نجد ان

$$E_y = -\left(\frac{\omega_c\tau}{\sigma_0}\right) J_x = -\left(\frac{B}{ne}\right) J_x \qquad \ldots(5-64)$$

من المعادلتين (5–57) , (5–64) نحصل على

$$R_H = -\frac{1}{ne} \qquad \ldots(5-65)$$

نلاحظ ان معامل هول لا يعتمد على ابعاد الشريحة المعدنية ولكن يعتمد على كثافـــة الالكترونات فقط . لقد لوحظ ان المعادلة(5-65)والمستنبطة من نظرية درود المبسطة لا تنطبق على جميع المعادن ، حيث وجد عملياً ان معامل هول يعتمد على شدة المجال المغناطيسي المسلط وعلى درجات الحرارة كما هوموضح في الشكل(5-10)ان الجدول (5-6) يبين المعادن التي تتبع المعادلة(5-65)والمعادن التي تشذ عنها .



الشكل(5-10) تغير R_H مع المجال المغناطيسي المسلط للانديوم

ان نظرية درود تتفق مع تجربة هول حيث المقاومة لا تعتمد على المجال المغناطيسي المسلط . وعندما نعوض عن قيمة $J_y = 0$ في المعادلة(5-63)نحصل على

$$J_x = \sigma_0 E_x$$

وهي النتيجة المتوقعة للتوصيلية الكهربائية عندما يكون المجال المسلط صفرا . ولكن اظهرت التجارب العملية ذات الدقة العالية بان المقاومة تعتمد على شدة المجال المغناطيسي المسلط . وعليه فان النظرية الكمية للمواد الصلبة لا بد من ان تجد حلاً لتفسير فشل نظرية درود لبعض الظواهر الفيزياوية للمعادن .

الجدول (6-5) تطابق العناصر القلوية مع المعادلة (65-5) وتطابق العناصر النادرة (Au, Ag, Cu) الى حد ما مع المعادلة (65-5) وشذوذ المعادن المتبقية .

METAL	VALENCE	$-1/R_H ne$
Li	1	0·8
Na	1	1·2
K	1	1·1
R	1	1·0
Cs	1	0·9
Cu	1	1·5
Ag	1	1·3
Au	1	1·5
Be	2	− 0·2
Mg	2	− 0·4
In	3	− 0·3
Al	3	− 0·3

5-10 بعض الصعوبات في نموذج الالكترون الحر

١ – ظاهرة هول

تتنبأ نظرية الالكترون الحر بان معامل هول للمعادن له كمية ثابتة $R_H = -\frac{1}{ne}$ لا تعتمد على درجة الحرارة T وزمن الاسترخاء τ وشدة المجال المغناطيسي المسلط B . كما انها تبين بان معامل هول ذو اشارة سالبة دائماً . ولكن من الناحية العملية نجد ان معامل هول يعتمد على درجة الحرارة وشدة المجال المغناطيسي (ومن المحتمل ان يعتمد على زمن الاسترخاء والذي لا يمكن السيطره عليه عملياً). ان معامل هول لبعض المواد مثل الكادميوم (Cd) والزنك (Zn) له قيم موجبة .

٢ - تبدل المقاومة بالمغنطة

توضح نظرية الالـكترون الحر انه عند تسليط مجال مغناطيسي خارجي عمودي على سلك معدني فان مقاومته لاتعتمد على شدة ذلك المجال . ولكن في معظم الحالات نجد ان المقاومة تعتمد على المجال B . حيث تزداد مقاومة العناصر النادرة والنحاس والفضة والذهب بصورة واضحة بزيادة المجال المسلط .

٣ - قانون وايدمان -فرانز

ان اهم نجاح لنظرية الالكترون الحر هو تفسير قانون وايدمان-فرانز ، حيث هناك تطابق جيد مع النتائج العملية عند درجات حرارة الغرفة وكذلك عند درجات الحرارة الواطئة . ولكن تفشل هذه النظرية في تفسير النتائج العملية عند درجات حرارية متوسطة حيث $k / \sigma T$ تعتمد على درجة الحرارة .

٤ - اعتماد التوصيلية الـكهربائية للتيار المستمر على درجات الحرارة حيث تتناسب التوصيلية الـكهربائية مع T^{-1} عند درجات الحرارة العالية ومع T^{-5} عند درجات الحرارة الواطئة .

ولكن لم تفلح نظرية الالكترون الحر في تفسير اعتماد التوصيلية الكهربائية على درجات الحرارة .

الاسئلة

5-1 ان التوصيلية الحرارية لنموذج من الجرمانيوم عند درجة حرارة 300 كيلفن تساوي 80 واط/ متر-كيلفن وان المقاومة النوعية الكهربائية تساوي 10^{-2}اوم متر . احسب النسبة بين التوصيلية الحرارية الالكترونية والتوصيلية الحرارية الناتجة عن اهتزازات الشبيكة في الجرمانيوم .

5-2 ان كثافة الالمنيوم تساوي 2700 كغم/ م^3 وان وزنه الذري هو 27 .فاذا علمت ان طاقة فيرمي للالمنيوم 12 الكترون- فولت فان المقاومة النوعية الكهربائية عند درجة حرارة 300 كيلفن تساوي 3×10^{-8} اوم- متر . جد معدل المسار الحر لا لكترونات التوصيل ثم احسب معدل سرعة الانسياق في مجال كهربائي قدره 1000 فولت/ م

5-3 (a) برهن على ان سرعة الامواج تساوي ضعف سرعة الطور باستخدام نموذج الالكترون الحر (b) جد سرعة مجموعة الامواج وسرعة الطور عندما تكون العلاقة بين الطاقة ε ومتجه الموجة k بالشكل التالي $\varepsilon = Ak^2 - Bk^4$

حيث A و B ثوابت .

5-4 اذا علمت ان طاقة فيرمي للنحاس عند درجة الصفر المطلقة تساوي 7 الكترون- فولت . جد معدل طاقة الكترونات التوصيل ومربع معدل السرعة لهذه الالكترونات .

5-5 ان كثافة البوتاسيوم هي 860 كغم / م^3 ووزنه الذري هو 39 (a) جد طاقة فيرمي ε_f للبوتاسيوم عند الصفر المطلقة .
(b) جد كثافة الحالة لنموذج من البوتاسيوم حجمها 1 سم^3 عند طاقة فيرمي .

5-6 احسب الحرارة النوعية الالكترونية لغرام- مول من النحاس عند درجة حرارة 300 كيلفن . عند اي درجة حرارية واطئة تتساوى فيها الحرارة النوعية الالكترونية والحرارة النوعية الناتجة عن مساهمة الفونونات لمعدن النحاس (درجة حرارة ديباي للنحاس تساوي 348 كيلفن)

5-7 برهن على ان معدل الطاقة لكل جسيم عند درجة الصفر المطلق للالكترونات التي تتبع قانون فيرمي- ديراك تساوي $\frac{3}{5}\varepsilon_f(0)$ ، حيث $\varepsilon_f(0)$ طاقة فيرمي عند الصفر المطلق . افترض ان قيمة طاقة فيرمي عند درجة حرارية مرتفعة نسبياً تساوي

$$\frac{3}{5}\ \varepsilon_f(0)\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{K_BT}{\varepsilon_f(0)}\right)^2\right]$$

جد النسبة بيّن $(Cv)_{FD}/(Cv)_{clas}$ لغاز الالكترون الذي طاقة فيرمي له تساوي 7 الكترون- فولت ، حيث $(Cv)_{FD}$ تمثل الحرارة النوعية لغاز إلكترون يتبع قانون فيرمي- ديراك و $(Cv)_{class}$ الحرارة النوعية لغاز إلكترون يتبع قانون توزيع ماكسويل- بولتزمان .

5-8 شريط من النحاس عرضه 1 سم وسمكه 0·1 سم يمر خلاله تيار كهربائي شدته 20 امبير . عند تسليط مجال مغناطيسي منتظم كثافه فيضه تساوي 1·2 تسلا وبصورة عمودية على سطحه ظهر فرق جهد كهربائي مقداره 18 مايكرو فولت بين نقطتين متقابلتين واقعتين على عرض الشريط . جد سرعة الانسياق للالكترونات وعددها في المتر المكعب الواحد .

الفصل السادس

نظرية الحزم في المواد الصلبة

6-1 المقدمة

ان الهدف الرئيسي من دراسة هذا الموضوع هومعرفة ما يحصل لالكترونات التوصيل في المواد الصلبة عندما تكون تحت تاثير مجال خارجي . وعليه لابد من عمل مقارنة بين الذرات المكونة للمادة الصلبة وبين الذرات نفسها عندما تكون معزولة . فبدلاً من ان تكون هناك مستويات طاقة محددة لكل ذرة منفردة . نجد ان البلورة تمتلك حزمة متكونة من عدد ضخم من مستويات الطاقة قريبة من بعضها . وعدد هذه المستويات يساوي عدد الذرات في البلورة وعليه فان حزمة الطاقة تظهر وكانها مستمرة . ان حزم الطاقة والفجوات بينها ومدى امتلاء كل حزمة بالالكترونات تحدد صفات المادة . وعلى هذا الاساس يمكن ان نميز بين المعادن واشباه الموصلات والعوازل .

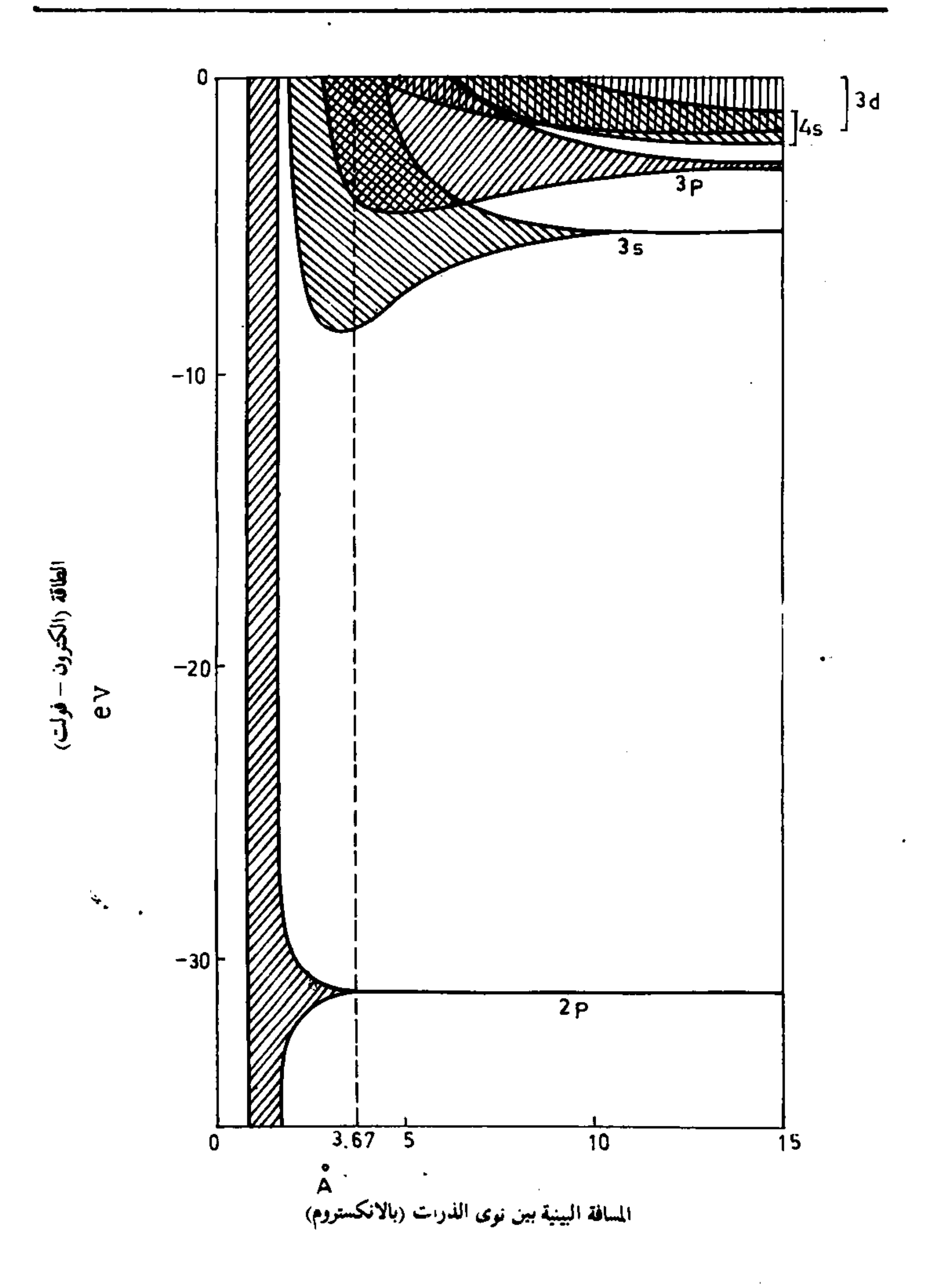
ان المعادن تتميز بان لها سطح فيرمي وعليه فان دراسة سطح فيرمي يعد موضوعا بالغ الاهمية في فيزياء الحالة الصلبة . حيث معرفة شكل سطح فيرمي يساعدنا على فهم الخواص الكهربائية والحرارية والبصرية للمعادن بالاضافة الى معرفة تركيب الحزم في المواد الصلبة .

6 - 2 منشأ الحزم في المواد الصلبة

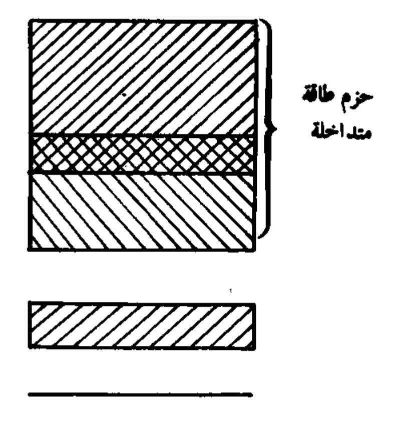
تكون الذرات في المواد الصلبة المتبلورة المعدنية أو غير المعدنية متقاربة جداً ، بحيث إن إلكتروناتها التساهمية تشكل نظاماً واحداً مشتركاً بين جميع ذرات البلورة . وهذا النظام يتفق مع مبدأ الانفراد (exclusion principle) ، وذلك إن مستويات طاقة الالكترونات الخارجية للذرات تتغير نتيجة للتفاعلات بين الذرات وبدلاً من أن تكون هناك مستويات طاقة محددة لكل ذرة نجد أن البلورة تمتلك حزمة تتكون من عدد ضخم من مستويات طاقة قريبة جداً بعضها من بعض . وأن عدد مستويات الطاقة المتجاورة يساوي عدد الذرات في البلورة ، لذ لك فأن حزمة الطاقة تظهر كأنها مستمرة إن حزمة الطاقة والفجوات (gaps) بينها ومدى امتلاء كل حزمة بالالكترونات تحدد صفات عديدة للمادة الصلبة وبضمنها قابليتها على التوصيل الكهربائي . وهناك طريقتان لفهم منشأ حزم الطاقة ، ابسطهما أن نلاحظ ما يحدث لمستويات طاقة الذرات المنفصلة عندما يقترب بعضها تدريجياً من بعض ، ليكون المادة الصلبة . ونستخدم هذه الطريقة هنا لنعطي فكرة أولية عن تكوين حزم الطاقة وبعض النتائج المترتبة عليها. وسوف ندرس ايضاً تكون الحزم على اساس التحديدات المتولدة من تكرار الشبيكة على حركة الالكترونات وهذه الطر يقة هي أكثر فعالية وتشكل اساس النظرية الحديثة للمواد الصلبة

أن الشكل (6-1) يوضح مستويات الطاقة في الصوديوم كدالة للمسافة بين النوى فالحالة 3s هي أول مستوى مشغول في ذرة الصوديوم التي تبدأ بالتوسع لتكون حزمة على حين لايبدأ المستوى 2p بالتوسع ما لم تكن المسافة بين النوى صغيرة جداً . نلاحظ انه في البداية يقل معدل الطاقة في الحزم 3s , 3p ، مشيراً الى تكوين قوة تجاذب بين الذرات .ان المسافة بين نوى ذرات الصوديوم الصلب تمثل الحالة التي عندها يكون معدل الطاقة ادنى ما يمكن .

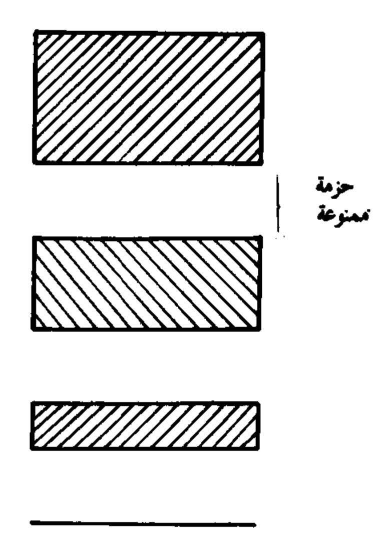
وتنشأ حزم الطاقة في مادة صلبة من مستويات الطاقة لذراتها المنفصلة ، وان الكترونا في مادة صلبة يمكن ان يمتلك طاقات تقع ضمن هذه الحزم فقط . وكما هو مبين في الشكل (6-2) ، فيمكن ان تتداخل حزم الطاقة المختلفة في الموادالموصلة فقط .ففي هذه الحالة تكون طاقة الالكترونات مستمرة . وفي مواد صلبة اخرى تكون حزم الطاقة غير متداخلة الشكل (6-3) .والمسافات الفاصلة بين هذه الحزم تمثل الطاقات الممنوعة للألكترونات وتدعى بالحزم الممنوعة forbidden bands .



الشكل (1 - 6)توسع مستويات الطاقة 3d و 3p لتكوين الحزم في بلورة الصوديوم .



الشكل(2 - 6) تداخل حزم الطاقة في المواد الصلبة .



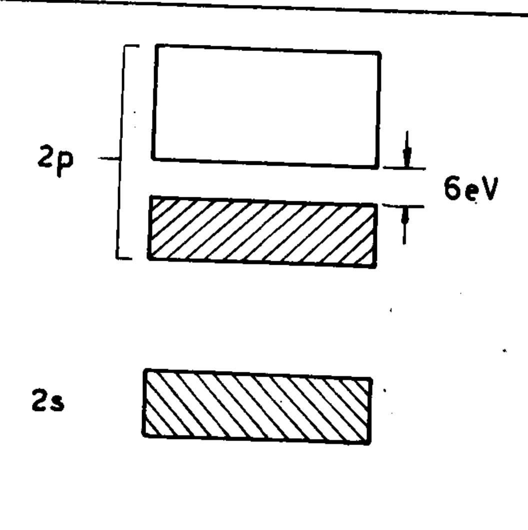
الشكل 3 - 6) حزمة ممنوعة تفصل حزم طاقة غير متداخلة

ان الصفات الكهربائية للمواد الصلبة تتحدد بتركيب حزم طاقاتها ومدى انشغالها بالالكترونات . الشكل 6-4 يوضح رسم تخطيطي مبسط لمستويات طاقة ذرة الصوديوم وحزم طاقة الصوديوم الصلب . فلكل ذرة صوديوم الكترون واحد في مدارها الخارجي في الحالة 3s . وهذ يعني ان الحزمة 3s في الصوديوم المتبلور نصف مشغولة ذلك لان كل مستوي في الحزمة . كما هو الحال لمستويات الذرة . يمكن ان يحتوي على الكترونين فقط . فعندما نسلط مجالا كهربائيا على قطعة من الصوديوم الصلب ، تحصل الالكترونات بسهولة على طاقة اضافية ولكنها تبقى في نفس الحزمة . فتكون الطاقة الاضافية على شكل طاقة حركية والالكترونات المتحركة تكون تياراً كهربائياً . ومن هذا يتضح ان الصوديوم هو موصل جيد للكهربائية . ونفس التفسير ينطبق على جميع المواد الصلبة المتبلورة ، التي لها حزم طاقة مشغولة جزئيا .

	صوديوم صلب	ذرة الصوديوم
3s		
2p		
2s		
1s		

الشكل(4 - 6) مستويات طاقة ذرة الصوديوم وما يقابلها في حالة الصوديوم الصلب .

الشكل 6-5 يمثل رسماً تخطيطياً مبسطا لحزم الطاقة في الماس . فهناك حزمة طاقة مشغولة كليا بالالكترونات تنفصل بفاصل 6 الكترون - فولت من حزمة فارغة تقع فوقها . وهذا يعني انه يجب ان تكتسب الالكترون طاقة اضافية لاتقل عن 6 الكترون فولت لكي ينتقل الى مستوى طاقة أعلى ذلك االنه لايمكن للالكترون ان يمتلك طاقة اضافية تضعه ضمن الحزمة الممنوعة ، اذ ان جميع مستويات الطاقة في حزمة الام مشغولة او بعبارة اخرى لايمكن تعجيل الكترون داخل الحزمة المملوءة بواسطة مجال كهربائي.



الشكل (5 - 6)حزم الطاقة في الماس .

وسبب ذلك هو ان الالكترون تعاني تصادمات عديدة مع الذرات داخل البلـــــورة (بمتوسط مسار حر حوالي 10^{-8} متر) ، وبذلك فالالكترون يفقد معظم طاقته الحركيـــة المكتسبة في المجال الكهربائي بعد كل تصادم . ولكي يكتسب الالكترون طاقة قدرها الكترون - فولت خلال مسافة 10^{-8} متر، علينا ان نسلط عليه مجالاً كهربائيا شدته 6×10^{8} فولت / متر . وهذا المجال هو اكثر من 10^{10} مرة من شدة المجال اللازم لتكوين تيار داخل بلورة الصوديوم . وعليه فان الماس هو مادة رديئة التوصيل للتيـــار الكهربائي ويصنف كمادة عازلة insulator .

ان للسليكون تركيباً بلورياً يشبه الماس ، ولذا هناك فجوة تفصل بين حزمة الطاقة العليا المملوءة بالالكترونات عن الحزمة الفارغة التي تليها . ان عرض هذه الفجوة في السليكون هو 1.1 الكترون فولت فقط وعليه فان قابلية توصيل السليكون عند درجات الحرارة الواطئة احسن بقليل من قابلية توصيل الماس .

فنسبة قليلة من الالكترونات في السليكون عند درجة حرارة الغرفة تكتسب طاقة حركية نتيجة للتهيج الحراري ، وتستطيع ان تقفز عبر الحزمة الممنوعة الى حزمة طاقة اعلى وهذه الالكترونات تكون كافية لتوليد تيار كهربائي محسوس عند تسليط مجال كهربائي

عليها . وعليه فالتوصيل الكهربائي للسليكون يقع مابين التوصيل الكهربائي للموصلات الجيدة والموصلات الرديئة ، ولذا يدعى السليكون بشبه موصل (semiconductor)

3 - 6 الجهد الدوري

لما كانت الايونات في بلورة تامة perfect crystal تنظم نفسها على شكل صفوف دورية ، فعليه لابد من دراسة سلوك الالكترونات في جهد$V(r)$ له نفس دورية الشبيكة : اي

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \qquad \ldots (6-1)$$

حيث $\vec{R}$ متجه الشبيكة . سوف نفترض ان ترتيب الايونات في صفوف دورية هي حالة مثالية ، حيث لا يمكن الحصول دائماً على بلورة تامة النقاوة . هناك دائماً احتمالية لوجود ايونات في مواقع غير مواقعها الاصلية وهذا يؤدي الى تحطيم التماثل الانتقالي (translation symmetry) حتى في البلورات النقية . واضافة الى ذلك فان الايونات في حالة غير مستقرة بسبب اهتزازاتها حول مواقع توازنها . ان عيوب البلورة (crystal defects) تلعب دوراً مهماً في المواد الصلبة حيث التوصيلية الكهربائية للمعادن لاتساوي ما لانهاية بسبب تلك العيوب . وعليهيمكن تناول الموضوع باتجاهين .

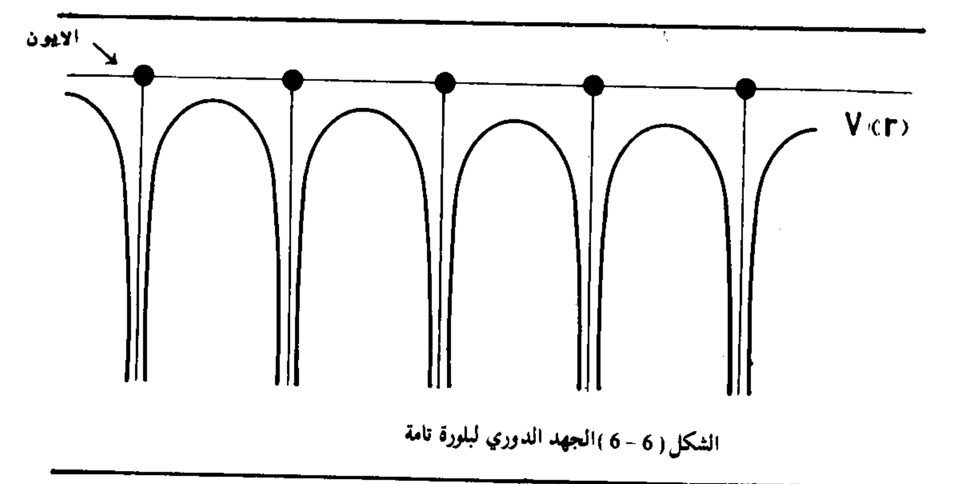
1 - بلورة خيالية تامة النقاوة يكون فيها الجهد تام الدورية .

2 - اي تحويرفي الدورية يعامل على انه تشوه قليل .

في هذاالبند سندرس مستويات الطاقة ودالات الموجة للالكترون المنفرد في بلورة ذات دورية مالا نهاية وكما موضح في الشكل(6-6)وعليه فان مجموعة الالكترونات المتعددة تعامل على انها تجمع لجسيمات غيرمتصادمة تشغل مستويات الكترون – واحد وحسب قوانين احصاء فيرمي . ان معادلة شرودينجر لالكترون منفرد تأخذ الصيغة التالية :

$$(-\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}))\Psi = \varepsilon\Psi \qquad \ldots (6-2)$$

حيث الجهد $V(\vec{r})$ له نفس دورية الشبيكة ويتضمن جميع تأثيرات الالكترونات عدا الالكترون تحت الدرس . يمكن حل المعادلة(6-2) وذلك باستخدام الشروط الدورية



الشكل (6 - 6) الجهد الدوري لبلورة تامة

(periodic conditions) . نعتبر اولاً ان البلورة ذات بعد واحد ، اي تحتوي على سلسلة خطية من الذرات تفصلها مسافة a . باستخدام شروط بورن – فون كارمان (Born – Von Karman) في الدورية ، نتصور ان السلسلة على شكل حلقة كبيرة طولها L وتحتوي على N من الدورات ، وبهذا

$$\Psi (x + Na) = \Psi (x) \qquad \ldots (6\text{–}3)$$

ان من اهم افتراضات نظرية الحزم في المواد الصلبة ، هي ان احتمالية وجود الالكترون في اي نقطة من نقاط البلورة متساوية ، اي ان احتمالية وجود الالكترون في النقاط التي تفصلها مسافة ma تكون متساوية ، حيث m تمثل عدد صحيح . وعليه

$$|\Psi (x + ma)|^2 = |\Psi (x)|^2 \qquad \ldots (6\text{–}4)$$

وهذا يعني

$$\Psi (x + a) = C\,\Psi (x)$$
$$\Psi (x + ma) = C^m\,\Psi (x)$$

حيث C عدد مركب ذو معامل يساوي واحداً . عندما m=N، فان

$$\Psi (x + Na) = C^N\,\Psi (x) \qquad \ldots (6\text{–}5)$$

وبمقارنة المعادلتين (6–5) و (6–3) نجد ان

$$C^N = 1$$

او

$$C = \exp [2\pi im / N] \qquad m = 0, 1, 2, \ldots N \quad \ldots (6\text{–}6)$$

وعليه فان الدالة Ψ تحقق الشرط التالي :

$$\Psi(x+a) = e^{ika}\Psi(x) \qquad \ldots (6\text{-}7)$$

حيث

$$k = \frac{2\pi m}{Na}$$

من المعادلات اعلاه ، يتضح ايضاً ان $d\Psi/dx$ تحقق نفس الشروط . هناك N من القيم غير المتساوية لـ k وكل قيمة تعود للمسافة $2\pi/a$ والتي سوف نطلق عليها فضاء k (k - space) . وعليه يمكن ان نضيف لقيم k مضاعفات $\pm\frac{2\pi}{a}$ بحيث لا تؤثر على شكل العلاقة (6-7). ان k تمثل عدداً كمياً (quantum number) وحداته نفس وحدات العدد الموجي (wave number) ويمثل مستويات مختلفة طاقاتها تعتمد ايضاً على k . ولما كانت الالكترونات تنتقل بالاتجاهين الموجب والسالب فسوف نلاحظ ان $\hbar k$ له نفس خاصية الزخم وان قيم k الصغيرة تمتد بين $-\pi/a$ و $+\pi/a$ وليست بين صفر و π/a . واذا كانت جميع المستويات في الحزمة مملوءة فهناك الكترون ذو قيمة k والكترون اخر ذو قيمة $-k$. وعليه فان الحزم المملوءة كلياً لا تساهم في عملية التوصيل الكهربائي . واذا كانت البلورة ذات ثلاثة ابعاد . فسوف نعتمد نفس الطريقة لايجاد شكل دالة الموجة الالكترونية . نفترض ان البلورة دورية بثلاثة اتجاهات وان طول كل دورة يساوي $\vec{c}, \vec{b}, \vec{a}$ في كل اتجاه . ونفترض كذلك ان شروط الدورية تنطبق على متوازي السطوح (parallelepiped) ذا ابعاد G_1a و G_2b و G_3c . حيث G_3, G_2, G_1 اعداد صحيحة كبيرة ونفترض ايضاً ان $\vec{c}, \vec{b}, \vec{a}$ متعامدة مع بعضها وباتجاه المحاور z . y . x على التوالي . وعليه نجد الدالة Ψ تحقق الشرط .

$$\Psi_{lmn}(x+a, y+b, z+c) = \exp[2\pi i(l/G_1 + m/G_2 + n/G_3)]\Psi_{lmn}(x,y,z) \qquad \ldots (6\text{-}8)$$

حيث n , m , l اعداد صحيحة . نكتب الان

$$k_x = 2\pi l / aG_1$$

$$k_y = 2\pi m / bG_2$$

$$k_z = 2\pi n / cG_3$$

نجد ان

$$\Psi_{lmn}(x+a, y+b, z+c) = \exp(ik_xa + ik_yb + ik_zc)\Psi_{lmn}(x,y,z)$$

لاي متجه $\vec{R}_i$ ، حيث $\vec{R}_i = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$ (r, q, p اعداد صحيحة) ، نجد ان

$$\Psi_k (\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \Psi_k (\vec{r}) \qquad \ldots (6\text{-}9)$$

ان المعادلة (6-9) تدعى بعلاقة بلوخ (Bloch relation) وهي اساس الدورية لدالات الموجة في بلورة تامة النقاوة وعليه يمكن حل معادلة شرودينجر بناء على ذلك الشرط . يمكن اشتقاق المعادلة (6-9)بطريقة اخرى . نفترض المؤثر الانتقالي (translation operator) (T_i) والذي يعمل على انتقال الشبيكة بمقدار R_i ، بحيث

$$T_i \Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{R}_i) \qquad \ldots (6\text{-}10)$$

ان المؤثرات T_i موحدة مع بعضها ، ولما كان الجهد دوريا فانها موحدة مع همولتونين (Hamittonian) وعليه فان القيم المسموحة هي ثوابت الحركة . ان دالة الموجة للالكترون في البلورة يجب ان تكون الدالات المسموحة لكل المؤثرات T_i ، وهذا يعني ان

$$T_i \Psi(\vec{r}) = C_i \Psi(\vec{r})$$

حيث C_i عدد . نفترض مؤثرين انتقالين T_j, T_i ، حيث

$$T_j T_i \Psi(\vec{r}) = C_j C_i \Psi(\vec{r})$$

ولكن حاصل ضرب $T_j T_i$ هومؤثر انتقالي يساوي T_m . وعليه

$$T_m \Psi(\vec{r}) = C_m \Psi(\vec{r})$$

واذا كان $C_m = C_i C_j$ و $\vec{R}_m = \vec{R}_i + \vec{R}_j$. فان العدد C_i يعتمد أسياً على $\vec{R}_i$. بحيث

$$C(\vec{R}) = e^{\vec{b}\cdot\vec{R}}$$

ان المتجه $\vec{b}$ يمثل دالة Ψ معينة . واذا كان المتجه $\vec{b}$ يمثل الجزء الحقيقي (real part)للدالة ، فان الدالة Ψ تمتد أسياً الى ما لا نهاية عند زيادة $\vec{R}$ ولكن هذا غيرمسموح به ، فعليه فان $\vec{b}$ يجب ان تاخذ الصيغة $i\vec{k}$ وان $\vec{k}$ ذات قيمة حقيقية ، وبذلك

$$T_i \Psi_k(\vec{r}) = \Psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \Psi_k(\vec{r})$$

وتدعى هذه المعادلة بنظرية بلوخ (Bloch theorem)

6 - 4 دالة بلوخ

بكتابة العلاقة التالية :

$$u_k(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\Psi_k(\vec{r})$$

نحصل على

$$u_k(\vec{r}+\vec{R}_i) = \exp[-i\vec{k}.(\vec{r}+\vec{R}_i)]\Psi_k(r+R_i)$$
$$= e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\Psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})$$

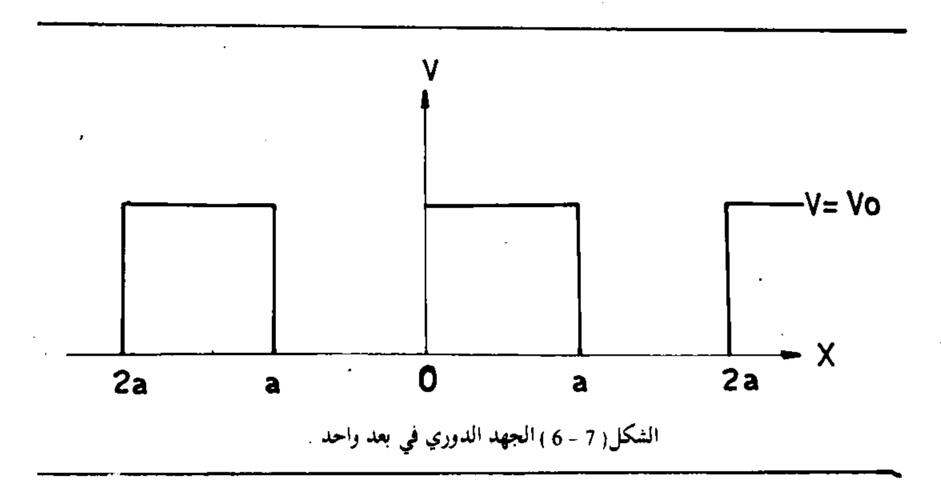
وهذا يعني ان $u_k(\vec{r})$ لها نفس دورية الشبيكة . يمكن ملاحظة ان

$$\Psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}.\vec{r}}u_k(\vec{r}) \quad \ldots(6\text{-}11)$$

وعليه فان دالات الموجة للالكترون الواحد في بلورة تامة النقاوة هي حاصل ضرب موجة مستوية (plane wave) بدالة لها نفس دورية الشبيكة . ان دالة الموجة هذه تسمى دالة بلوخ (Bloch function) . ان دالة بلوخ $u_k(\vec{r})$ تسلك نفس سلوك الموجة الذرية قرب نوى الذرات .

6 - 5 بلورة ذات شبيكة ببعد واحد

لكي نلاحظ منشأ الحزم المسموحة والممنوعة كنتيجة لشروط الدورية . نفترض بلورة ذات شبيكة ببعد واحد وكما في الشكل (7-6)



الشكل(7 - 6) الجهد الدوري في بعد واحد .

ان طول الدورة في هذا التركيب يساوي 2a وعليه فان شروط بلـــــوخ هي :

$$\Psi_k (x + 2a) = e^{2iak} \Psi_k (x)$$

و

$$\frac{d}{dx} \Psi_k (x + 2a) = e^{2iak} \frac{d}{dx} \Psi_k (x) \quad \ldots (6-12)$$

وحسب الميكانيك الكلاسيكي فان الالكترون يبقى محصورا داخل جدار الجهد اذا كانت طاقته ε اقل من V_0 .اما اذا كانت طاقته اكبر من V_0 فان سرعة الالكترون داخل جدار الجهد تساوي $\left(\frac{2\varepsilon}{m_0}\right)^{1/2}$ وسرعته عند جدار الجهد تساوي $\left(2\frac{\varepsilon - V_0}{m_0}\right)^{1/2}$

ولكن حسب النظرية الكمية فان الالكترون يكون موجودا خارج جدران الجهد بالرغم من ان طاقته ε اقل من V_0

ان حل معادلة شرودينجر للحالة $- a \leq x \leq 0$ تاخذ الصيغة التالية

$$\Psi_1 = A \cos q_0 x + B \sin q_0 x \quad \ldots (6-13)$$

حيث

$$q_0 = \frac{2m_0 \varepsilon}{\hbar^2}$$

ان الثوابت A ، B نحدد قيمهما باستخدام شروط الدورية . وبنفس الطريقة . عندما تكون $0 \leq x \leq a$ فان

$$\Psi_2 = C \cos q x + D \sin q x \quad \ldots (6-14)$$

حيث

$$q^2 = \frac{2m (\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}$$

ان قيمة q تكون خيالية عندما $\varepsilon < V_0$. باستخدام الشروط الحدودية (boundary conditions) نلاحظ ما يلي

1 ان Ψ ، $\frac{d}{dx}\Psi$ تكون مستمرة عند $x = 0$

2

$$\Psi(+ a) = e^{2iak} \Psi(- a)$$

و

$$\frac{d}{dx} \Psi (a) = e^{2iak} \Psi(- a)$$

وعليه

$$\Psi_2 (0) = 0$$

و

$$\frac{d}{dx}\Psi_2(0) = q\,D$$

بذلك

$$\Psi_2(+a) = \cos qa\,\Psi_2(0) + \frac{1}{q}\sin qa\,\frac{d}{dx}\Psi_2(0)$$

و

$$\frac{d}{dx}\Psi_2(+a) = -q\sin qa\,\Psi_2(0) + \cos qa\,\frac{d}{dx}\Psi_2(0)$$

وباستخدام المصفوفات matrix نحصل على

$$\begin{vmatrix} \Psi_2(+a) \\ \\ \frac{d}{dx}\Psi_2(a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos qa & \frac{1}{q}\sin qa \\ \\ -q\sin qa & \cos qa \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_2(0) \\ \\ \frac{d}{dx}\Psi_2(0) \end{vmatrix}$$

وبنفس الطريقة

$$\begin{vmatrix} \Psi_1(0) \\ \\ \frac{d}{dx}\Psi_1(0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos q_0 a & \frac{1}{q_0}\sin q_0 a \\ \\ -q_0\sin q_0 a & \cos q_0 a \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1(-a) \\ \\ \frac{d}{dx}\Psi_1(-a) \end{vmatrix}$$

والان

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$$

و

$$\frac{d}{dx}\Psi_1(0) = \frac{d}{dx}\Psi_2(0)$$

وعليه

$$\begin{vmatrix} \Psi_2(a) \\ \frac{d}{dx}\Psi_2(a) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi_1(-a) \\ \frac{d}{dx}\Psi_1(-a) \end{vmatrix}$$

حيث

$$b_{11} = \cos qa \cos q_0 a - \frac{q_0}{q} \sin qa \sin q_0 a)$$

و

$$b_{22} = -\frac{q}{q_0} \sin qa \sin q_0 a + \cos qa \cos q_0 a$$

وبذلك نحصل على

$$\begin{vmatrix} \Psi_2(a) \\ \frac{d}{dx}\Psi_2(a) \end{vmatrix} = e^{2iak} \begin{vmatrix} \Psi_1(-a) \\ \frac{d}{dx}\Psi_1(-a) \end{vmatrix}$$

وبذلك فان

$$\begin{vmatrix} b_{11} - e^{2iak} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} - e^{2iak} \end{vmatrix} = 0$$

ان المحدد $b_{ij} = 1$ وعليه فان حل المصفوفة اعلاه

$$e^{2iak} = \frac{1}{2}(b_{11} + b_{22}) \pm i\left[1 - \frac{1}{4}(b_{11} + b_{22})^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

او

$$\cos 2ka = \frac{1}{2}(b_{11} + b_{22})$$

$$= \cos qa \cos q_0 a - \frac{q^2 + q_0^2}{2qq_0} \sin qa \sin q_0 a, \qquad \ldots (6-15)$$

لما كانت q , q_0 تتضمنان الطاقة ε فان المعادلة (6 - 15) تمثل العلاقة بين ε و k ضمنيا . ولما كانت قيمة k حقيقية ، فان المسالة ذات معنى فيزياوي مقبول عندما لا تتجاوز القيمة المطلقة للجانب الايمن من المعادلة (6 - 15) على الواحد . ان هذه المعادلة توضح لنا منشا الحزم المسموحة والممنوعة للمواد الصلبة . واذا كانت $\varepsilon < V_0$ فان $q = ip$ وهي كمية خيالية ، وعليه

$$\cos 2ka = \cosh pa \cos q_0 a - \frac{q_0^2 - p^2}{2pq} \sinh pa \sin q_0 a \qquad \ldots (6-16)$$

واذ كانت V_0 كبيرة جدا و $\varepsilon << V_0$ (بالنسبة للمستويات العميقة) فان المعادلة (6 - 16) تصبح كالاتي :

$$\cos 2ka = \cosh pa \left[\cos q_0 a + \frac{p}{2q_0} \sin q_0 a \right] \ldots (6-17)$$

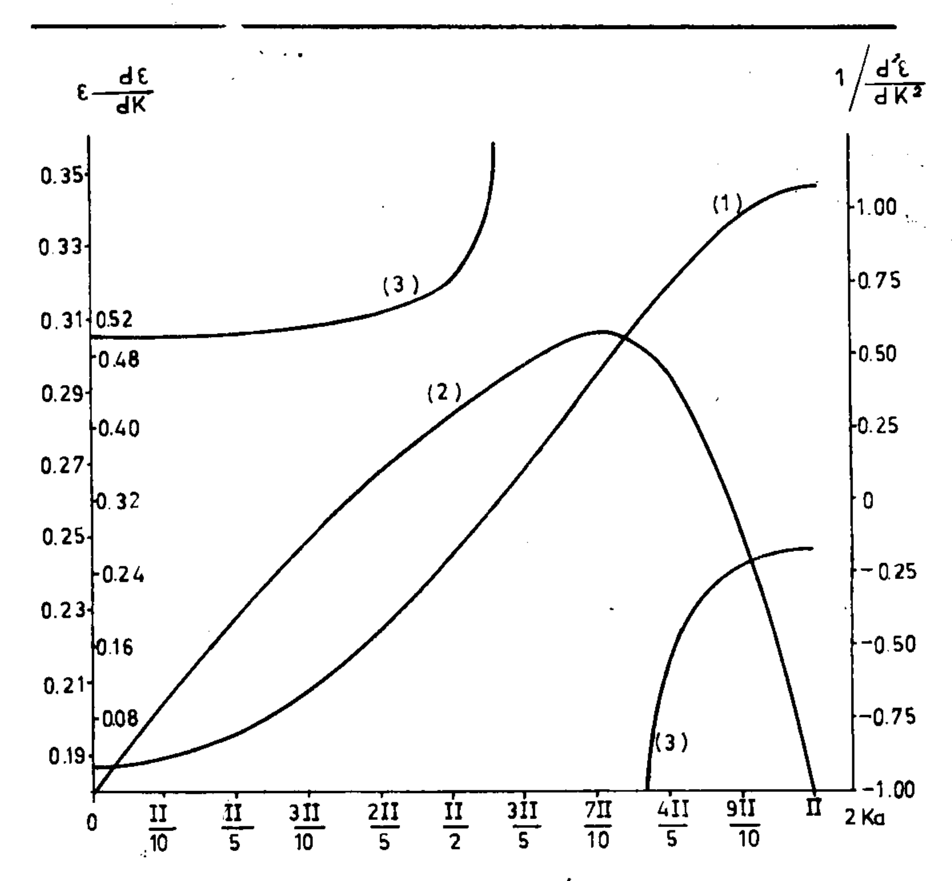
حيث $p >> q_0$

ان المعادلة (6 - 17) تتحقق فقط عندما تكون مستويات الطاقة ضيقة حيث $\sin q_0 a$ يكون سالبا وصغيرا جدا (اذا كانت $\cos q_0 a$ موجبة).
من الشرط $\sin q_0 a = 0$ نحصل على

$$\varepsilon_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} \qquad \ldots (6-19)$$

ان المعادلة (6 - 18) تمثل القيم المسموحة للطاقة عندما يكون جهد الجدار ذات عمق ما لا نهاية وهذا يعود للمستويات الذرية البعيدة . وعليه فان هذه المستويات لاتتوسع كثيراً عندما تقترب الذرات من بعضها لتكوين البلورة . ان الجدول (6 - 1) يوضح الحزم المسموحة والممنوعة عندما تكون المسافة بين الذرات 2a

تساوي 3 انكستروم و V_0 تساوي حوالي 6 الكترون- فولت. ان فجوات الطاقة (energy gaps) تقل كثيرا بالنسبة للطاقات العالية . ان الشكل (6 - 8) يوضح العلاقة بين ε و k لاول حزمة وكما يوضح $d\varepsilon/dk$ والتي كما سنرى تتناسب مع سرعة الالكترون وكذلك يوضح الشكل العلاقة بين k و $(d^2\varepsilon/dk^2)^{-1}$ والتي تتناسب مع الكتلة الفعلية (effective mass) للالكترون .



الشكل (8 – 6) مثال ببعد واحد لتوضيح منشأ الحزمة الاولى : المنحني (1) يمثل العلاقة بين ε , k والمنحني (2) يوضح سرعة الالكترون dε / dk والمنحني (3) يوضح الكتلة الفعلية للالكترون $(d^2\varepsilon / dk^2)^{-1}$

ε	cos 2k.a	k		ε	cos2ka	k	
0	7. 39	خيالية		1. 31 – 1. 35	> 1	خيالية	
0. 16	1. 58	خيالية		1. 351	1	0	الحزمة الثالثة
0. 1863	1	0			– 1	± π/6	
0. 2444	0	± π/12	الحزمة الاولى	2. 65			
0. 3461	– 1	± π/6		2. 65 – 2. 74	< – 1	خيالية	
0. 4444	– 1. 325	خيالية		2. 74	– 1	± π/6	الحزمة الرابعة
0. 6271	– 1	± π/6	الحزمة الثانية				
0. 8644	0	± π/12		4. 61	1	0	
1. 3077	1	0					

6 - 6 مناطق بريلوين

نفترض الحالة التي تعود لمتجه الموجة $\vec{k}$ ، وبذلك

$$\Psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R})\,\Psi_k(\vec{r})$$

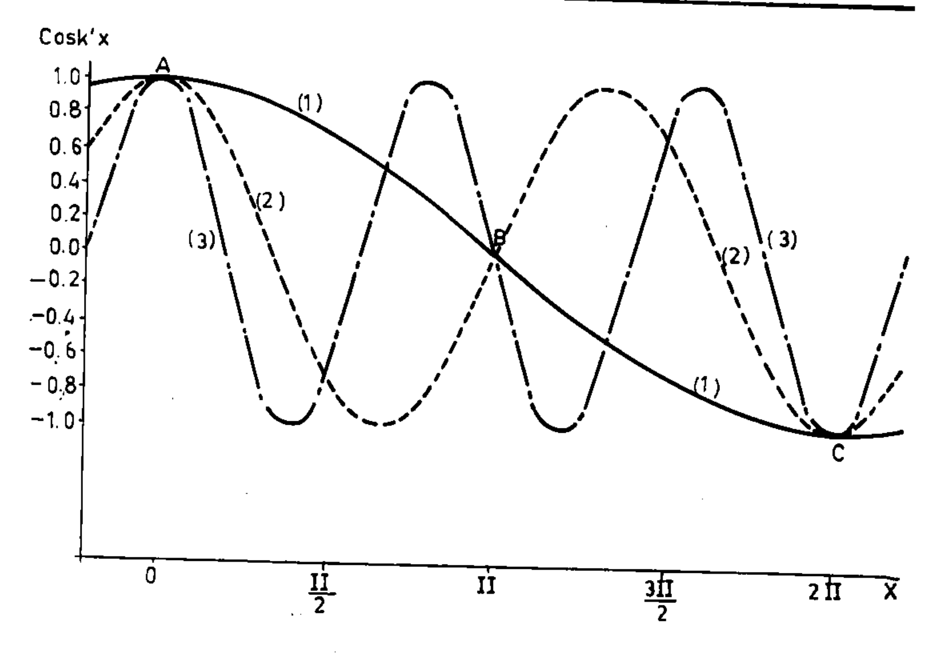
يمكننا ان نضيف لـ $\vec{k}$ اي متجه $\vec{K}_n$ له خاصية مقلوب الشبيكة(reciprocal lattice) نفسها لنحصل على

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{K}_n$$

وعليه يمكننا كتابة العلاقة التالية

$$\Psi_k(\vec{r} + \vec{R}_i) = \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{R}_i)\,\Psi_k(\vec{r})$$

وهذا يعني ان الحالة Ψ_k تحقق شرط بلوخ في الدورية كما لوكان للحالة متجه الموجة $\vec{k}'$. ان الحالة الاصلية التي تم وصفها بالمتجه $\vec{k}$ هي ليست حالة وحيدة(unique) بل يمكن ان يكون لها عدد مالا نهاية من متجهات الموجة الممكنة وتختلف عن بعضها بمقلوب الشبيكة . وعليه يمكن القول ان دالات موجة الالكترون – الواحد لبلورة تامة النقاوة هي دورية في مقلوب الفضاء (reciprocal space) وان القيم المسموحة للطاقة $\varepsilon(k)$ يجب ان تكون دالة دورية لـ $\vec{k}$ وان الدورية هي مقلوب الشبيكة ويمكن أن نطبق الطريقة نفسها عند دراسة تردد اهتزازات الشبيكة كدالة لانتشار متجه الموجة $\vec{q}$. وعند دراسة اهتزازات الشبيكة فان الموجة تدرس فقط عند نقاط الشبيكة وبذلك فان المتجهات $\vec{k} + \vec{K}_n$ تكون متكافئة وكما في الشكل(9 - 6)وعليه فهناك حزمة واحدة لترددات اهتزازات سلسلة خطية من الذرات المتساوية . ولكن دالات الموجة الالكترونية تدرس عند كل قيم x وبذلك فان الموجات المستوية والموضحة في الشكل(9 - 6)تعود الى حزم مختلفة ذات طاقات مختلفة . انه ليس من الضروري دراسة اكثر من حالة واحدة تعود للحالات المتكافئة للمتجهات $\vec{k} + \vec{K}_n$. ان انسب طريقة يمكن اعتمادها هي اختزال كل المتجهات المتكافئة والحصول على إصغر قيمة لها عن طريق طرح متجهات مقلوب الشبيكة . ان نهايات المتجهات المختزلة تملأ منطقة حول نقطة الاصل في مقلوب الفضاء وتدعى بالمنطقة المركزية او منطقة بريلوين الاولى (first Brillouin zone) . ولما كانت المناطق الاخرى والتي تقع خارج هذه المنطقة لا تستخدم دائما ، فنطلق على المنطقة المركزية (central zone) بمنطقة



الشكل (6 – 9) الموجات المتكافئة في بعد واحد . $K_n = \pm 2n , k' = k + K_n$

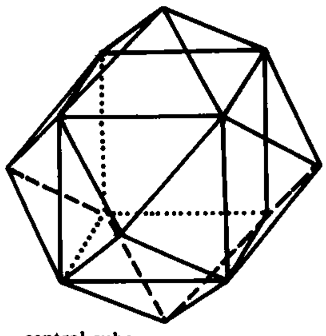
Curve (1): cos (0·5x)

Curve (2): cos (− 1·5x)

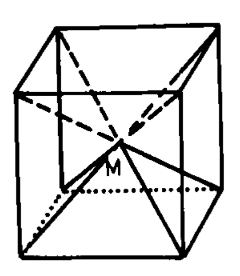
Curve (3): cos(2·5x)

في حالة اهتزازات الشبيكة فان الموجات تعرف عند نقاط الشبيكة A و B وC وجميعها نقاط متكافئة .

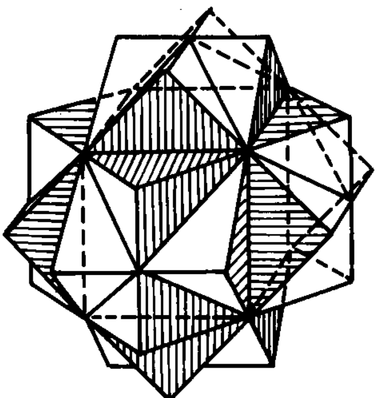
بريلوين (Brillouin zone) . ان حجم منطقة بريلوين هو حجم الخلية الابتدائية للشبيكة نفسه. ان منطقة بريلوين الثانية تتضمن جميع المتجهات الصغيرة غير المتكافئة والتي لا تحتويها المنطقة الاولى وبالطريقة نفسها يمكن الحصول على مناطق بريلوين اخرى . على نقيض ذلك هو الشبيكة في الفضاء الاعتيادي ، حيث كل وحدة خلية مكافئة للخلايا الاخرى. الشكل (10 – 6) يوضح مناطق بريلوين الاربعة الاولى لمكعب بسيط .



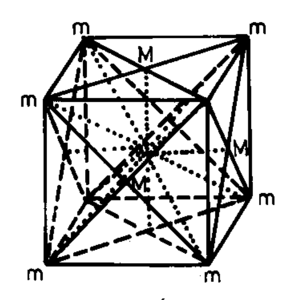
1st zone - central cube
2nd zone - between central cube and dodecahedron



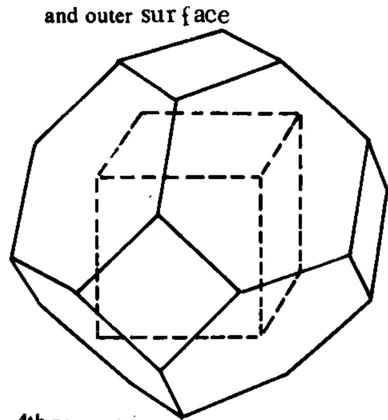
Reduction of 2nd zone



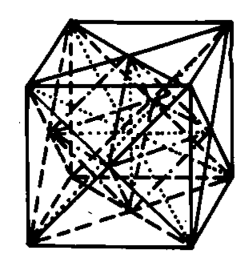
3rd zone - between dodecahedron
and outer surface



Reduction of 3rd zone



4th zone - between 3rd zone
and truncated octahedron



Reduction of 4th zone

الشكل (6-10) مناطق بريلوين الاربعة الاولى لشبيكة مكعب بسيط .

6 - 7 مخطط مناطق بريلوين

ان المخطط الذي فيه جميع المتجهات $\vec{k}$ تقع ضمن منطقة بريلوين يسمى بمخطط منطقة الاختزال reduced zone scheme . فعليه لكل قيمة للطاقة هناك اكثر من قيمة لـ k . في بعض الاحيان ، انه لمن الملائم استخدام مخطط المنطقة الممتدة (extended zone scheme) وتكون الطاقة غير مستمرة عند حدود هذه المنطقة لدراسة العلاقة بين k,ε في جميع الخلايا في مقلوب الفضاء نستخدم مخطط المناطق المتكررة (repeated zone scheme) . ان المثال التالي يوضح جميع هذه المخططات : نفترض شبيكة ببعد واحد وان المسافة بين الذرات تساوي a . ان دورية مقلوب الشبيكة يساوي $2\pi/a$ و منطقة بريلوين الاولى تمتد من $k = -\pi/a$ الى $k = +\pi/a$ بينما تمتد منطقة بريلوين الثانية من $-2\pi/a$ الى $-\pi/a$ ومن $+\pi/a$ الى $2\pi/a$. كما نفترض ان الجهد الدوري ضعيف جداً ، فعليه فان العلاقة بين k و ε سوف تختلف قليلا من $\varepsilon = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. ان هذا الاختلاف يحصل عند حدود منطقة بريلوين ، حيث هناك فجوات بين قيم الطاقة المسموحة . الشكل (6 - 11a) يوضح مخطط المنطقة الممتدة والذي يضم جميع قيم k المسموحة . يمكننا الان اختزال قيم k المسموحة لتقع ضمن منطقة بريلوين الاولى وذلك عن طريق اضافة او طرح عدد ملائم من الدورات $2\pi/a$ من مقلوب الشبيكة . مثلاً ، يمكن اختزال النقطة $3\pi/a$ + الى $\dfrac{\pi}{a} = \dfrac{3\pi}{a} - \dfrac{2\pi}{a}$ وبذلك نحصل على الشكل (6 - 11b) والذي يسمى مخطط منطقة الاختزال . وعليه هناك اكثر من قيمة لـ $\vec{k}$ تعود الى الطاقة ε نفسها . ولابد من ملاحظة ان كل منحني هو قطعة من المقطع المكافيء الاصلي ولكنه ازيح بمقدار $2\pi n/a$. وعليه فان الطاقة في هذا المخطط عندما يكون الجهد الدوري ضعيف جداً ، تساوي

$$\varepsilon_n(k) = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\right)\left(k + \frac{2\pi n}{a}\right)^2 \qquad \dots (6-19)$$

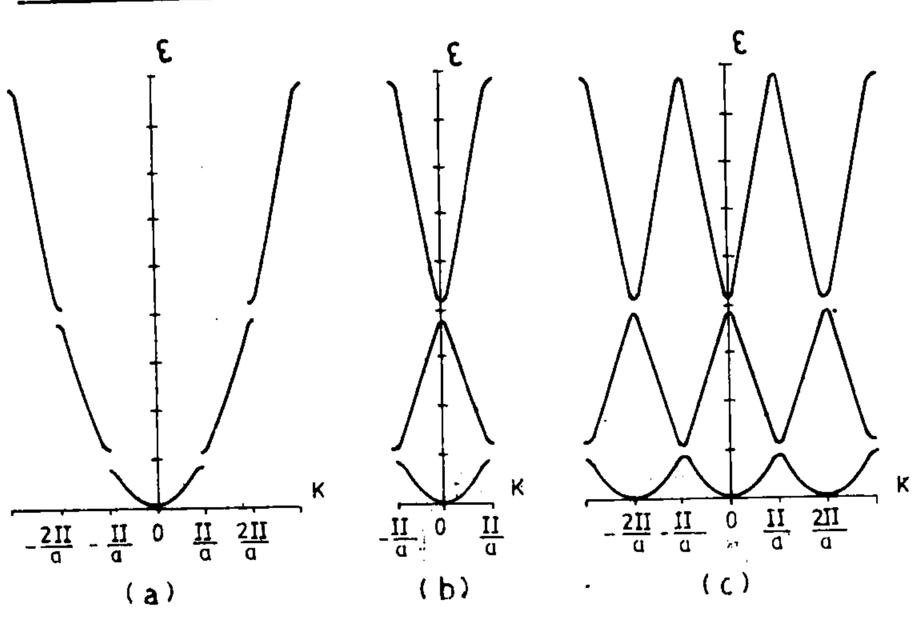
حيث

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

يمكن كتابة المعادلة (6 - 19) بثلاثة ابعاد بالصيغة التالية

$$\varepsilon_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} |\vec{k} + \vec{K}_n|^2 \qquad \dots (6-20)$$

عند تكرار المنحنيات في الشكل (6 - 11c) خلال فضاء k نحصل على مخطط المنطقة المتكررة ، حيث الطاقة ε دالة دورية للمتجه k . ان اختيار مخطط معين يعود الى نوعية المسألة التي يعالجها ، فمثلاً في حساب تركيب الحزم يتم اختيار مخطط منطقة الاختزال لانه اكثر ملائمة بالنسبة للمخططات الاخرى .



الشكل (6 11) مخطط مناطق بريلوين في بعد واحد(a)المنطقة الممتدة(b)منطقة الاختزال(c)المنطقة المتكررة

6 - 8 حساب الحزم بطريقة نموذج الالكترون الحر

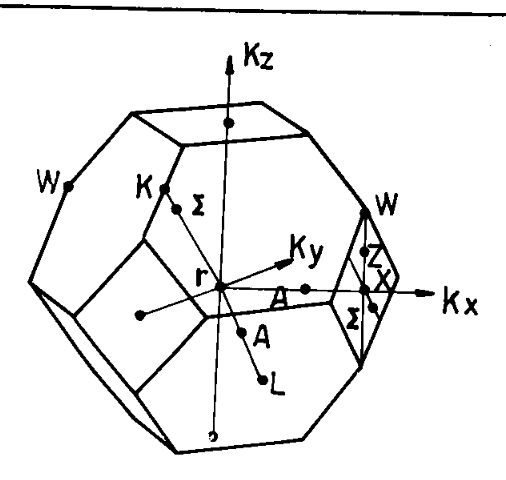
ان نموذج الالكترون الحر يعتمد على فكرة درود ولورنس حيث الالكترونات في المعادن لاتعاني من أي قوة في حالة غياب المجال الخارجي . عند تطبيق نظرية الحزم في المواد الصلبة فان هذه الفكرة تكون معروفة بوجود جهد ثابت V وغالبا ما يعتبر صفر . ان الالكترونات تتمثل بالموجات المستوية . وعلية

$$\Psi_{k.n}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{K}_n)\cdot\vec{r}} \qquad \ldots(6\quad 21)$$

حيث $\vec{K}_n$ يمثل متجة مقلوب الشبيكة . لكل قيمة لـ $\vec{k}$ هناك ملانهاية من الحالات وكل حالة يشار لها بمقلوب الشبيكة K_n . ان طاقة هذه المستويات تأخذ الصيغة التالية :

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0} | k + K_n |^2 \qquad \ldots (6-22)$$

بأستخدام المعادلة (22 - 6) يمكننا تركيب الحزم حسب نموذج الالكترون الحر وبدون صعوبة . ولتوضح ذلك ، نفترض تركيباً بلورياً على شكل مكعب متمركز الاوجـــه . ان منطقة بريلوين تكون عـــلى شكل مثمـــن السطوح مقطـــوع (truncated octahedron) وكما موضح في الشكل (12 - 6) . إن مركز السطح عند $k = 0$ يأخذ الرمز Γ . هناك عدد من نقاط التماثل ومنها النقطة X بالاتجاه (100) .



الشكل (12 - 6)منطقة بريلوين لمكعب متمركز الوجه .

ان النقاط X تفصلها مسافة قدرها متجه مقلوب الشبيكة وعليه هناك ثلاثة نقاط X غير متكافئة .

ان النقاط التي تقع على نفس الاتجاه .من Γ الى X . يشار لهـــا بالـــرمـــز Δ .

وأما النقاط التي تقع بالاتجاه (111) ، في مركز أحد الاوجة السداسية . فيشار لها بالرمز L وهناك اربعة من نقاط L غير المتكافئة . أن النقاط التي تقع بنفس الاتجاه من Γ الى L يشار لها بالرمز A . أما K فهي أي نقطة بالاتجاه (110) و W بالاتجاه (021) . وللسهولة نفترض أن طول ضلع المكعب في الشبيكة البلورية الاعتيادية

يساوي 2π وعلية فأن المسافة $\Gamma - X$ لمنطقة بريلوين تساوي واحداً . نكتب المعادلة (22 - 6) بدلالة الاحداثيات الكارتيزية لتصبح

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_{z,n}) = (k_x + K_{nx})^2 + (k_y + K_{ny})^2 + (k_z + K_{nz})^2 \quad \ldots (6-23)$$

ان سطوح الطاقة الثابتة تكون كروية ومتمركزة عند جميع نقاط مقلوب الشبيكة .

إن أصغر المتجهات لمقلوب الشبيكة (أن مقلوب الشبيكة لـ fcc هو b,c) هـي .

$$\vec{K}_0 = 0$$
$$\vec{K}_1 = (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$$

أي ثمانية متجهات طول كل منها $\sqrt{3}$

$$\vec{K}_2 = (\pm 2, 0, 0)$$

أي ستة متجهات طول كل منها 2

$$\vec{K}_3 = (\pm 2, \pm 2, 0)$$

أي اثنى عشر متجهاً طول كل منها $\sqrt{8}$

$$\vec{K}_4 = (\pm 3, \pm 1, \pm 1)$$

أي اربع وعشرون متجهاً طول كل منها $\sqrt{11}$

$$\vec{K}_5 = (\pm 2, \pm 2, \pm 2)$$

أي ثمانية متجهات طول كل منها $\sqrt{12}$

وعليه فأن مستويات الطاقة عند $k = 0$ هي :

$\varepsilon_0 = 0$ ، $\varepsilon_1 = 1$ ، $\varepsilon_2 = 4$ ، $\varepsilon_3 = 8$ وهكذا . ان ε_1 تتضاعف ثماني مرات وان ε_2 تتضاعف ست مرات وهكذا.

نفترض الان احد اتجاهات Δ . فمثلاً الاتجاه (010) حيث

$k_x = k_z$ و

$0 \le k_y \le 1$.

وليس من الضروري أن نأخذ الاتجاه السالب لان

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(-\vec{k})$$

عند تطبيق لمعادلة (23 - 6) لـ K_0 نحصل على حزمة غيرمنحلة (non- degenerate)

أي

$$\varepsilon_0 = k_y^2$$

وللحالة K_1 نحصل على الاحتمالات التالية :

$$k_x + K_x = \pm 1$$
$$k_y + K_y = k_y \pm 1$$
$$k_z + K_z = \pm 1$$

وبذلك نحصل على حزمتين الاولى

$$\varepsilon_1^{(1)} = 2 + (k_y - 1)^2$$

وهذه تتضاعف اربع مرات . والحزمة الثانية

$$\varepsilon_1^{(2)} = 2 + (k_y + 1)^2$$

أيضاً تتضاعف اربع مرات . اما بالنسبة لـ K_2 فنحصل على الاحتمالات التالية :

$k_x + K_x = \pm 2$	$k_y + K_y = k_y$	$k_z + K_z = 0$
$k_x + K_x = 0$	$k_y + K_y = k_y \pm 2$	$k_z + K_z = 0$
$k_x + K_x = 0$	$k_y + K_y = k_y$	$k_z + K_z = \pm 2$

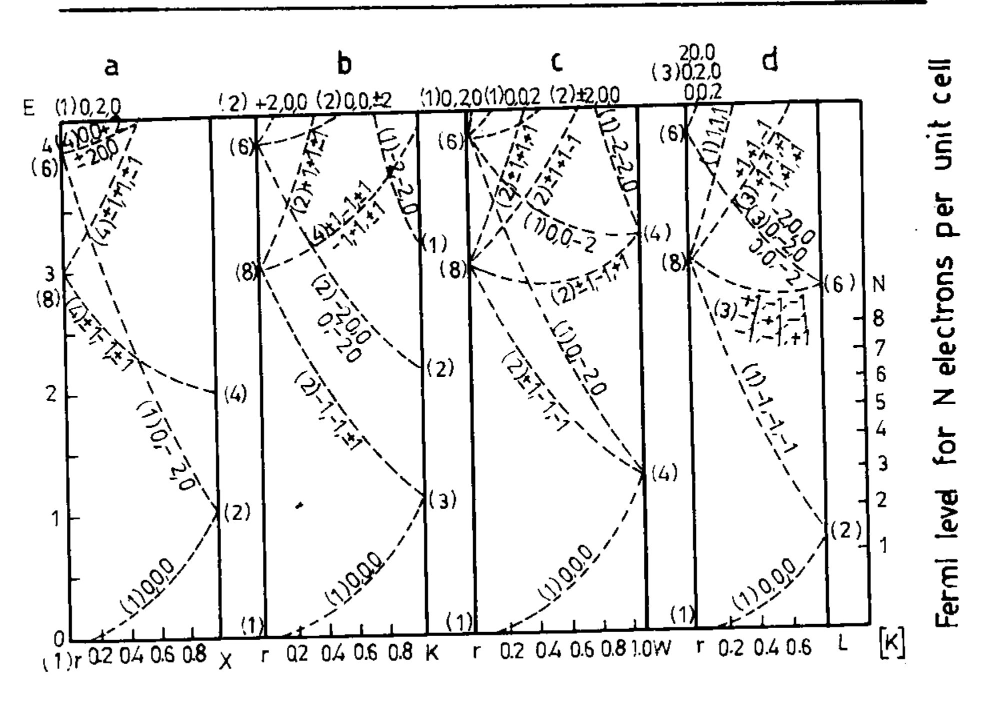
وبذلك نحصل على ثلاثة حزم

$\varepsilon_2^{(1)} = 4 + k_y^2$ وتتضاعف اربع مرات

$\varepsilon_2^{(2)} = (k_y - 2)^2$ لاتتضــاعف

$\varepsilon_2^{(3)} = (k_y + 2)^2$ لاتتضــاعف

إن هذه الحزم موضحة بالشكل (6 - 13a) . وبنفس الطريقة نحصل على الحزم بالاتجاهات (110) و(120) و(111) وهي موضحة بالاشكال (6 - 13a , b,c,d) على التوالي .



الشكل (13 - 6) حزم الطاقة لمكعب متمركز الوجه وحسب نموذج الالكترون الحر .

9 - 6 كثافة الحالة

لقد لاحظنا في الفصل الخامس ان هناك $2(V/8\pi^3)$ حالة الكترونية لوحـــدة الحجم في فضاء k . وعلية لوحدة حجم بلورية . فأن عدد الحالات في حجم $d^3\vec{k}$ في فضاء k هي :

$$dn_s = \frac{1}{4\pi^3} d^3\vec{k} \qquad \dots (6-24)$$

إن عدد الحالات لوحدة الطاقة $dn_s/d\varepsilon$ تسمى كافة الحالة ويرمز لها $D(\varepsilon)$ وتساعدنا كثيراً في تفسير عدد من الظواهر الفيزياوية .

أن معرفة كثافة الحالة عند مستوى فيرمي له اهمية كبيرة في معرفة خواص المعادن كالحرارة النوعية الالكترونية مثلاً . لما كانت كثافة الحالة في فضاء k لها مقدار ثابت $\frac{1}{4\pi^3}$. فعلية فأن عدد الحالات في حجم مقداره A في فضاء k يساوي

$$n_s = \frac{1}{4\pi^3} \int_A d^3k \qquad \ldots (6-25)$$

والان نختار سطحاً ذا طاقة ثابتة تترواح قيمتها بين ε و ε+dε ونأخذ مقطعاً من الحجم في فضاء k ، فنلاحظ أن

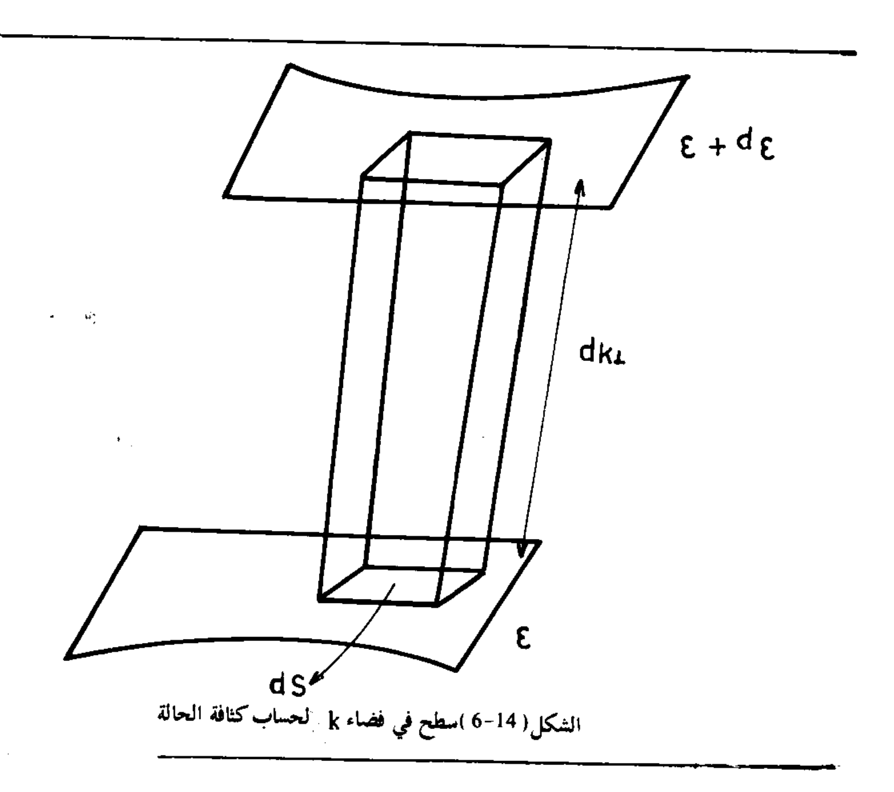
$$d\varepsilon = \text{grad}_k\, \varepsilon \,.\, dk = |\text{grad}_k\, \varepsilon|\, dk_\perp$$

$$d^3k = dS\, dk_\perp = \frac{dS\, d\varepsilon}{|\text{grad}_k\, \varepsilon|}$$

حيث dS تمثل مساحة مقطع من سطح ذي طاقة ثابتة ، كما في الشكل (14 - 6) . وعلية فأن

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{dS}{|\text{grad}_k\, \varepsilon|}$$

حيث التكامل يشمل سطحاً ذا طاقة ثابتة $\varepsilon(k) = \varepsilon$ في فضاء k



الشكل (14-6) سطح في فضاء k لحساب كثافة الحالة

لنحسب الان كثافة الحالة عندما تكون العلاقة بين k, ε بالصيغة التالية : –

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar k^2}{2m^*} \qquad \ldots (6 - 26)$$

حيث تمثل m^* الكتلة الفعلية (effective mass) للالكترون . وعلية

$$\mathrm{grad}_k \varepsilon = \frac{\hbar^2 k}{m^*}$$

وبذلك فأن

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \quad \frac{m^*}{\hbar^2} \int \frac{dS}{k}$$

ولما كانت سطوح الطاقة الثابتة كروية الشكل ، فأن

$$dS = 4\pi k^2$$

و

$$D(\varepsilon) = \frac{m^*}{4\pi^3 \hbar^2} 4\pi k = \frac{m^* k}{\pi^2 \hbar^2}$$

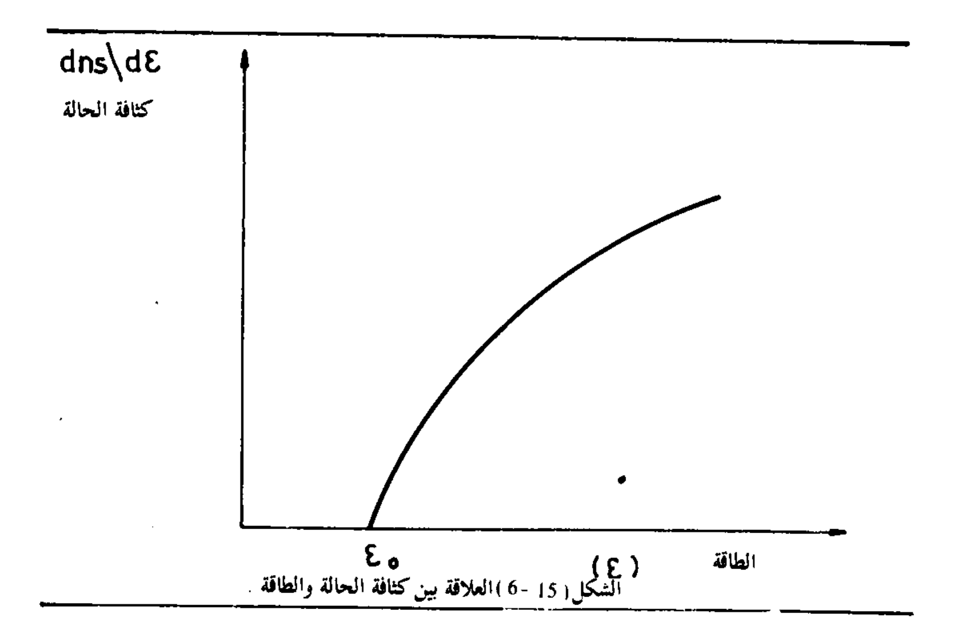
ومن المعادلة (26 - 6) فأن

$$(\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2} = \frac{\hbar k}{(2m^*)^{\frac{1}{2}}}$$

فعلية : –

$$D'(\varepsilon) = \frac{(2m^{*3})^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} (\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2} \qquad \ldots (6 - 27)$$

نلاحظ من المعادلة (27 - 6) ان كثافة الحالة تتناسب مع $\varepsilon^{1/2}$ وهذا يعني أن كثافة الحالة تأخذ شكل قطع مكافيء (parabolic shape) كما في الشكل (15 - 6) ، ونلاحظ ايضاً أن كثافة الحالة تتناسب مع $m^{*3/2}$ حيث بزيادة الكتلة الفعلية تزداد كثافة الحالة .



الشكل (15 - 6) العلاقة بين كثافة الحالة والطاقة .

10 - 6 الـكتلة الفعلية

عندما تنتشر الموجة $e^{i(kx - \omega t)}$ في وسط التشتت (dispersion medlum) فأن سرعة الموجة تساوي $\frac{\omega}{k}$. بينما سرعة مجموعة الامواج (group Velocity) $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ في بعد واحد وتساوي $grad_k \omega$ في ثلاثة ابعاد من العلاقتين .

$$\varepsilon = \hbar.\omega$$

و

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \qquad \dots (6-28)$$

نحصل على ان سرعة الالكترون

$$v = grad_p \omega = \frac{1}{\hbar} grad_k \varepsilon \qquad \dots (6-29)$$

عندما يتعرض الالكترون داخل البلورة الى قوة خارجية $\vec{E}$ (نتيجة تسليط مجال كهربائي) فأن مقدار التغير الحاصل في طاقته في زمن dt يساوي

$$d\vec{\varepsilon} = \vec{F} . \vec{v}\, dt = F. \frac{1}{\hbar} grad_k \varepsilon\, dt \qquad \dots (6-30)$$

ومن العلاقة التي تربط بين k, ε نحصل على

$$d\varepsilon = \text{grad}_k \varepsilon \,.\, dk \qquad \ldots (6-31)$$

ومن المعادلتين (30 - 6) و (31 - 6) نلاحظ أن

$$\frac{1}{\hbar} F . \text{grad}_k \varepsilon \, dt = \text{grad} \, \varepsilon . \, dk$$

أو

$$\text{grad}_k \varepsilon . \left[\frac{1}{\hbar} F \, dt - dk \right] = 0$$

ولكن

$$\text{grad}_k \, \varepsilon \neq 0$$

وذلك لان قيمة k غير ثابتة لوجود المجال الكهربائي ، وعلية فأن .

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \qquad \ldots (6-33)$$

وبذلك فأن القوة تمثل معدل تغير زخم البلورة $\hbar k$ (crystal momentum) .
إن الالكترون تحت تأثير هذه القوة يتحرك بتعجيل مقداره

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{\hbar} \text{grad}_k (\vec{F} . \vec{v})$$

أو

$$\vec{a} = \frac{1}{\hbar^2} \text{grad}_k [\vec{F} . \text{grad}_k \varepsilon] \qquad \ldots (6-34)$$

ان المعادلة(34 - 6) لالكترون داخل البلورة تماثل قانون نيتون في الحركة .

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{m} \vec{F} \qquad \ldots (6-35)$$

إن المركبات الثلاثة للمتجة $\vec{a}$ في المعادلة (34 - 6) هي

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j} F_j \qquad \ldots (6-36)$$

من الواضح انه لايمكن تطبيق قانون نيوتن بصيغته البسيطة (المعادلة 35 - 6)
لان الالكترون داخل البلورة يعاني من تأثيرات قوى أخرى بالاضافة الى المجال الكهربائي المسلط علية .

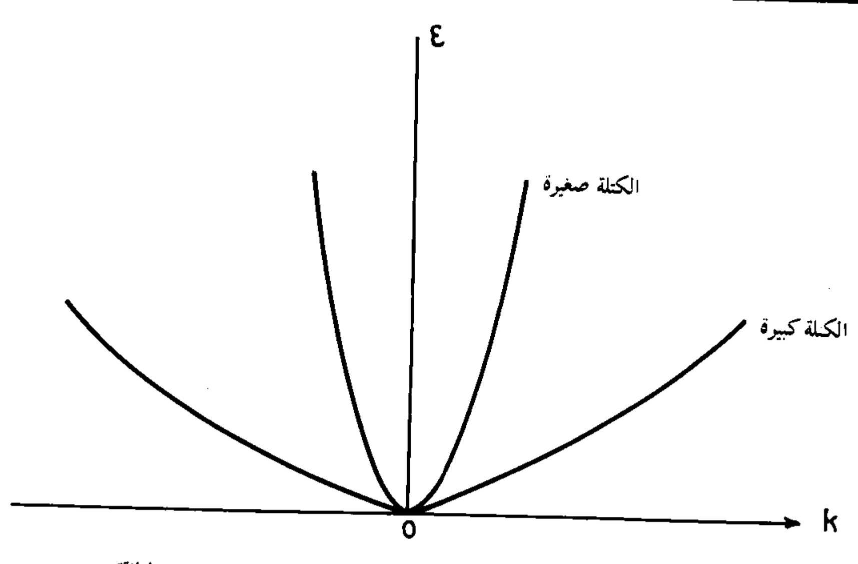
وعليه فلا بد من ادخال مفهوم الكتلة الفعلية (m^*) في المعادلة (35 - 6) لتصبح

$$\vec{a} = \left(\frac{1}{m^*} \right) \vec{F} \qquad \dots (6-37)$$

وبمقارنة المعادلتين (36 - 6) و (37 - 6) نحصل على

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \, dk_j} \qquad \dots (6-38)$$

وبذلك فأن الكتلة العديدية m (scalar mass) قد استبدلت بالكتلة الفعلية m^* وهي كمية متجهة . ونلاحظ من المعادلة (38 - 6) أن الكتلة الفعلية m^* تتناسب عكسياً مع تحدب الحزمة ، بحيث عندما تكون الكتلة صغيرة فأن التحدب يكون كبيراً والعكس صحيح كما هو موضح ذلك في الشكل (16 - 6) .



الشكل (16-6) العلاقة العكسية بين الكتلة الفعلية وتحدب حزمة الطاقة .

عندما تكون القوه $\vec{F}$ باتجاه اعتباطي . فأن تعجيل الالكترون لايكون دائماً باتجاه هذه القوه ولكن يمكن تحليلة الى مركبين . الاولى موازية للمجال والاخرى عمودية عليه . ان المركبة الموازية للمجال تكون المسؤولة عن نقل الطاقة من المجال الى الالكترون والصعوبة هنا هي في معرفة الكتلة العددية m_F التي تنتج عنها مركبة التعجيل الموازية

للمجال . نفترض أن $\vec{e}$ وحدة متجة (unit vector) بأتجاه $\vec{F}$. وبضرب طرفي المعادلة (37 – 6) بـ $\vec{e}$ نحصل على مركبة التعجيل المطلوبة a_F ، أي

$$a_F = \vec{e} \cdot \vec{a} = \vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*} \right) \vec{F}$$

$$= F\vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*} \right) \vec{e}$$

$$= \frac{F}{m_F}$$

وعلية

$$\frac{1}{m_F} = \vec{e} \cdot \left(\frac{1}{m^*} \right) \vec{e} \qquad \ldots (6-39)$$

انه لغاية في الاهمية استخدام مفهوم الكتلة الفعلية لمعرفة مسار الالكترون خلال حزمة الطاقة في بلورة نقية جداً (خالية من الشوائب وعيوب البلورة الاخرى) . نفترض أن أن شكل العلاقة بين k, ε وكما موضح في الشكل (17 - 6) . نفترض أن الالكترون يبدأ الحركة عند النقطة $\vec{k} = 0$. ان تعجيل الالكترون يساوي eF/m_F وسرعته بعد مرور فترة زمنية dt يساوي $e\vec{F}dt/m_F$. حيث m_F هي الكتلة الفعلية باتجاه المجال للحالة $\vec{k} = 0$. عندما تكون البلورة تامة النقاوة . فان التعجيل يستمر وبذلك فأن طاقة الالكترون و $\vec{k}$ تزداد ان . ان كتلة الالكترون m_F تتغير بتغير قيمة k . فعندما تقترب k من حافة منطقة بريلوين فان الكتلة الفعلية تصبح سالبة وبذلك تتباطأ سرعة الالكترون لتصبح صفرا عند الحالة B . وبما ان الحالتين A وB متكافأتان في مخطط منطقة الاختزال وبذلك . يمكن اعتبار ان الالكترون موجود عند الحالة A . وبزيادة التعجيل يصبح عند النقطة O . وعليه فان الالكترون يتذبذب بين A و B وان حركته الدورية هذه تكون مكممة . لكي نفهم سبب مرور التيار في البلورة . على اساس تكون الحزم . لابد من الاشارة الى ما يلي :

1 اذا كانت الحزمة مملوءة جزئياً . فأن الالكترونات تزاح باتجاه المجال المسلط وبذلك (عندما تكون الكتلة الفعلية موجبة) فأن عدد الالكترونات التي تتحرك

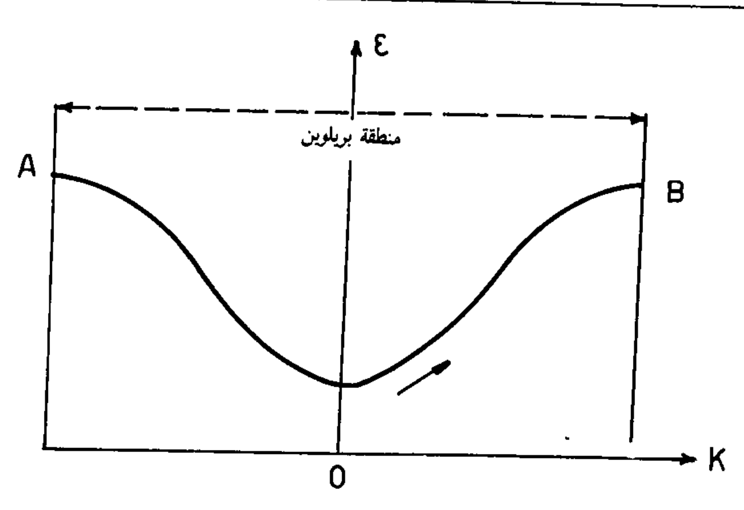
بأتجاه المجال أكثر من عدد الالكترونات التي تتحرك بعكسه وهكذا يتولد تيار نهائي في البلورة .

2 - عندما تكون الحزمة مملوءه كلياً ، فأن التيار يساوي صفراً. أن ابسط مثال على ذلك هو عندما تكون العلاقة بين ε و k ببعد واحد . ان التيار يتناسب مع تكامل السرعة بالنسبة لـ k (قيم k هي حدود منطقة بريلوين) ، وبذلك

$$v = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d\varepsilon}{dk}$$

$$\int v dk = \varepsilon(A) - \varepsilon(B) = 0$$

اي ان التكامل هو فرق الطاقة عند نهايتي منطقة بريلوين وهذا يساوي صفراً لتكافؤ الحالتين A و B .



الشكل (17-6) حركة الالكترون خلال حزمة الطاقة .

11 - 6 مفهوم الفجوات الموجبة .

عندما تكون حزمة الطاقة مملوءة كليا عدا الحالة التي يكون متجه موجتها $\vec{k}$ ، فيمكن القول انه توجد فجوة (hole) عند تلك الحالة ومتجه موجتها يساوي $\vec{k}'$ ايضا . ان الفجوة تتحرك في المجال وكأن لها كتلة فعلية تعاكس تماما الكتله الفعلية للالكترون ولها نفس زخم البلورة ، اي

$$\left(\frac{1}{m_h^*(k)} \right) = - \left(\frac{1}{m_e^*(k)} \right) \qquad \ldots (6-40)$$

ان الفجوات تتولد قرب الحافات العليا لحزمة الطاقة ، حيث الكتلة الفعلية للالكترونات عند تلك الحافات تكون سالبة وبذلك فان الكتلة الفعلية للفجوات وكذلك شحنتها تكون موجبة . لكي نبرهن هذه الحقيقة لابد من مراجعة البند(9 - 6)والذي يشير الى ان التيار الكلي المحمول من قبل الالكترونات يساوي صفرا عندما تكون حزمة الطاقة مملوءة كليا وكذلك معدل تعجيل هذه الالكترونات يساوي صفرا ويمكن توضيح ذلك بالمثال التالي :

نفترض ان حدود منطقة بريلوين تمتد من k_0- الى k_0+ وعليه فان معدل التعجيل

$$\bar{a} = \int_{-k_0}^{k_0} \frac{F}{m^*} \, dk$$

ان القوة F لاتعتمد على k وباستخدام المعادلة(38 - 6)نحصل على

$$\bar{a} = \frac{F}{\hbar^2} \left[\frac{d\varepsilon}{dk} \right]_{-k_0}^{+k_0}$$

ولكن $\frac{d\varepsilon}{dk}$ تتناسب مع السرعة والتي تساوي صفرا عند حافتي منطقة برِيلوين . وبذلك فان معدل تعجيل $\bar{a} = 0$.

والان عندما تكون حزمة الطاقة مملوءة عدا الحالة التي يكون متجه موجتها k' فان التعجيل يساوي التكامل اعلاه ناقصا تعجيل الالكترون الذي متجه موجته $\vec{k}'$ اي

$$\vec{a} = 0 - \frac{1}{m^*(\vec{k}')} \vec{F}$$

ولما كانت الكتلة الفعلية للالكترون m_e^* قرب قمة حزمة الطاقة سالبة ، فان الكتلـــة الفعلية للفجوة m_h^* المتولدة نتيجة فقدان الكترون تكون موجبة . اما بالنسبة للتيار فيمكن ان نقسم كثافة التيار (curent density) الكلية $\vec{J}$ والتي تساوي صفر ، الى قسمين الاول $\vec{J}_1$ والناتج عن الالكترون الذي متجه موجته $\vec{k}'$ والثاني $\vec{J}_2$ والناتج عـــــن الالكترونات الاخرى في حزمة الطاقة . اي

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$
$$0 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

ولكن

$$\vec{J}_1 = - e\vec{v}(\vec{k}')$$

وعلية فأن

$$\vec{J}_2 = + e\vec{v}(\vec{k}') \qquad ١$$

وبذلك فأن فقدان الكترون في الحزمة يكافيء تكون فجوة موجبة ذوكتلة فعلية m_h^* موجبه

12 - 6 دراسة سطح فيرمي

ان دراسة سطح فيرمي ذات اهمية بالغة في فيزياء الحالة الصلبة . حيث معرفة شكل سطح فيرمي يساعدنا في فهم الخواص الكهربائية والبصرية للمعادن . اما الهدف الثاني من هذه الدراسة يساعدنا في فهم تركيب حزم الطاقة في المواد الصلبة هناك طرق عديدة تستخدم لدراسة سطح فيرمي منها :

1 - الظاهره السطحية الشاذة
2 - التــردد المــداري .
3 - الظاهرة الصوتية المغناطيسية
4 - ظاهرة دي هاز – فان الفن

ويمكن اجراء التجارب اعلاه في حالة تحقق الشروط التالية : –

1 - توفر بلورة احادية التبلور .
2 - بلورة نقية جداً (خالية من الشوائب وعيوب البلورة الاخرى) .
3 - درجات حـرارة واطئـــة .
4 - مجال مغناطيســي عال .

إن من اهم الطرق المستخدمة فيَ قياس سطح فيرمي هي ظاهرة دي‌هاز – فان الفن حيث ان نتائجها العملية تحقق معلومات دقيقة عن سطح فيرمي ولمعظم المعادن وسوف نتطرق لها مفصلا في هذا البند .

1 - 12 - 6 الظاهرة السطحية الشاذة

إجريت اول دراسة لتحديد شكل سطح فيرمي من قبل العالم بارد (Pippard) وذلك بقياس انعكاس وامتصاص الموجات الكهرومغناطيسية الدقيقة (micrownve electromagnetic) من سطح معدن النحاس ((بغياب المجال المغناطيسي) . واذا كان تردد الموجات الدقيقة (ω) ليس كبيراً . فأن المجال الناتج عن هذه الموجات سوف يخترق المعدن لمسافة δ_c . حيث .

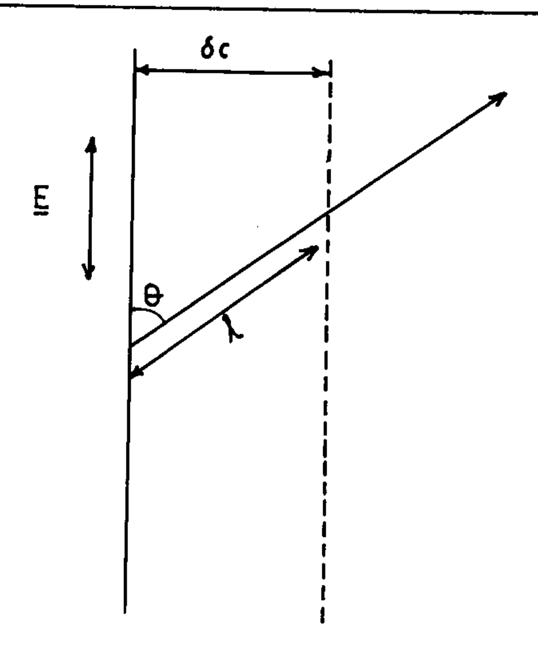
$$\delta_c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \omega\sigma/2}} \qquad \ldots (6 - 41)$$

وتسمى δ_c العمق السطحي الكلاسيكي (classical skin depth) و σ التوصيلية الكهربائية . تم اشتقاق المعادلة (41 - 6) على اساس ان العمق السطحي δ_c أكبر من معدل مسار الالكترون الحر l . عندما تكون البلورة نقية جداً وعند درجات حرارية واطئة فأن δ_c تقترب أو أقل من معدل مسار الالكترون الحر l وبذلك فأننا نحتاج الى نظرية أكثر دقة لتفسير سبب عدم استخدام نظرية تناقص المجال اسياً خلال المسافة δ_c وبذلك تسمى الظاهرة السطحية الشاذه (anomalous skin effect) . نلاحظ في الشكل (18 - 6) أن الالكترونات التي تمر خلال العمق السطحي لها المقدرة على امتصاص الطاقة من المجال المسلط (اذا كانت δ تمثل العمق السطحي . فأن جزءاً من الالكترونات يساوي δ/l يساهم في عملية التوصيل الكهربائي وعلية فأن

$$n_{eff} = \frac{\delta}{l} n$$

حيث n كثافة الالكترونات و n_{eff} كثافة الالكترونات الفعالة و δ هي العمق السطحي. وبذلك فأن :

$$\sigma_{eff} = \left(\frac{\delta}{l} \right) \sigma_0$$



الشكل(18- 6)الظاهرة السطحية الشاذة

حيث σ_0 التوصيلية الكهربائية الاعتيادية و σ_{eff} التوصيلية الفعالة .

$$\sigma_{eff} = \frac{\delta}{l}\left(\frac{ne^2 l}{mv_f}\right) = \frac{n_e^2\,\delta}{m\,v_f} \qquad \dots (6-42)$$

وبالتعويض عن σ بـ σ_{eff} في المعادلة (41 – 6) نحصل على :

$$\delta = \left(\frac{1}{\mu_0\,\omega\,\sigma_{eff}{}^{1/2}}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad \dots (6-43)$$

من المعادلتين (42 – 6) و (43 – 6) نحصل على

$$\delta^3 = \frac{2mv_f}{\mu_0\,\omega\,ne^2} \qquad \dots (6-44)$$

نلاحظ من المعادلة (44 – 6) . أن التوصيلية الفعالة تتناسب مع $\omega^{1/3}$ ولاتعتمد على مسار الالكترون الحر وبذلك فأننا ضمن حالة شاذة تدعى الظاهرة السطحية الشاذة.

أن من اهم مميزات هذه الظاهرة هو اعتمادها على الشكل الهندسي لسطح فيرمي وذلك لان الالكترونات التي تسير موازية للسطح هي التي تساهم في عملية التوصيل الكهربائي .

2 - 11 - 6 التردد السايكلتروني (المداري)

غالباً ما نعالج حركة الالكترون بوجود المجال المغناطيسي بطريقة شبه كلاسيكية إن حركة الالكترون في البلورة ، تحت تأثير مجال مغناطيسي منتظم وثابت ، تأخذ الصيغة التاليــــة :

$$\hbar\dot{\vec{k}} = e\vec{v} \times \vec{B} \qquad \ldots (6-45)$$

وعلية فأن $\vec{k}$ تتغير فقط عند مستويات عمودية عن المجال وان المدرات في فضاء k هي مقاطع هذه المستويات مع سطوح الطاقة الثابتة . في الفضاء الاعتيادي (real space) إن حركة الالكترونات (بوجود المجال المغناطيسي) تتمثل بمسارات حلزونية محورها موازٍ للمجال المسلط $\vec{B}$. لايجاد الفتره الزمنية اللازمة لكي يعمل الالكترون مداراً كاملاً ، نفترض مدارين في فضاء k في مستوى عمودي على المجال المسلط $\vec{B}$. (كما في الشكل 19 - 6) . إن الطاقة ε تعود للمدار الاول والطاقة $\varepsilon + d\varepsilon$ للمدار الثاني . إن الزيادة الحاصلة في k عند الانتقال من مدار الى اخر تساوي

$$dk = \frac{d\varepsilon}{|\text{grad}_k \varepsilon|_{\perp B}} = \frac{d\varepsilon}{\hbar v_{\perp}} \qquad \ldots (6-46)$$

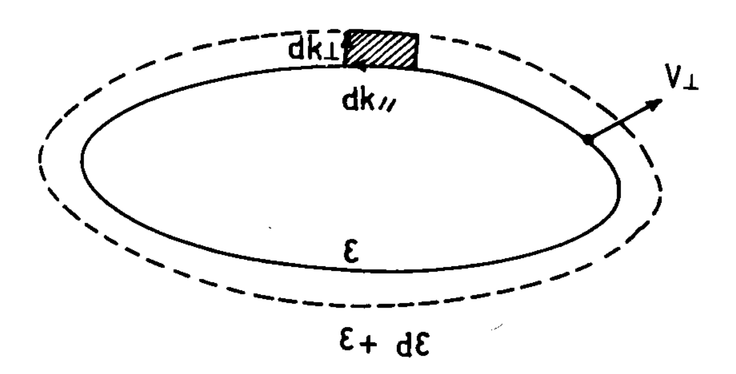
حيث $v_{\perp}$ هي مركبة السرعة في مستوى عمودي على المجال B

ان المساحة في فضاء k والمحصورة بين المدارين

$$dA = \frac{d}{\hbar} \oint \frac{dk}{v} \qquad \ldots (6-47)$$

يمكن كتابة

$$dk = \dot{k}\, dt$$



الشكل(19 - 6)المدارات الالـكترونية في فضاء k بوجود المجال المغناطيسي .

وعليه فان زمن دورة كاملة $T = \oint \frac{dk}{|k'|}$

من المعادلتين (6-45) و(6-46) نحصل على

$$T = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk}{v_\perp} = \frac{\hbar^2}{eB} \frac{dA}{d\varepsilon} \qquad \dots (6-48)$$

وعليه فان التردد السايلكتروني(المداري) (cycltron frequency) يساوي

$$\omega_c = \frac{2\pi}{T} = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \Big/ \frac{dA}{d\varepsilon} \qquad \dots (6-49)$$

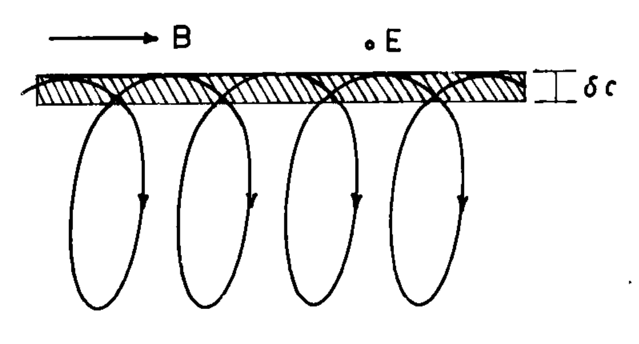
حيث ω_c تختلف قيمتها من مدار الى اخر . ان التردد المداري في الفضاء الاعتيادي

$$\omega_c = \frac{eB}{m_c^*} \qquad \dots (6-50)$$

وبمقارنة المعادلتين (6-49) و(6-50) نحصل على

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{dA}{d\varepsilon} \qquad \dots (6-51)$$

حيث m_c^* تسمى الكتلة الفعلية السايكترونية (المدارية)(cycltron effective nass) عند تسليط مجال مغناطيسي مواز لسطح البلورة ، فان الالكترونات تعمل مدارات حلزونية كما في الشكل (6-20) . من المعروف ان الموجات الكهرومغناطيسية لا تستطيع اختراق المعدن الى مسافات بعيدة ، فعليه فان الالكترونات تستطيع امتصاص الطاقة من المجال الكهربائي عندما تدخل منطقة العمق السطحي δ_c . تستطيع هذه الالكترونات امتصاص الطاقة في كل دورة تدخل فيها منطقة العمق السطحي وبنفس



الشكل(20 - 6)ظاهرة أزبل – كانر

طور المجال المغناطيسي المتناوب المسلط وبذلك تحصل ظاهرة الرنين والتي تسمى بظاهرة رنين ازبل– كانر (Azbel – Kaner resonance) ، اي يحدث الرنين في كل مرة يحقق فيها التردد (ω) المعادلة التالية

$$\omega = n\omega_c = \frac{eB}{m_c^*} \qquad \dots (6\text{–}52)$$

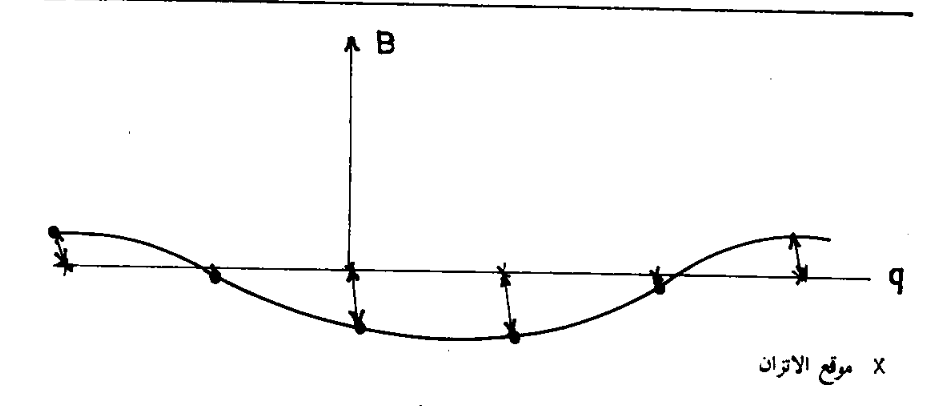
حيث n عدد صحيح . من الناحية العملية ، تثبت قيمة ω وتغير قيمة المجال المغناطيسي وبذلك فان شرط الرنين يصبح

$$\frac{1}{B_n} = \frac{ne}{\omega\, m_c^*}$$

ومنها يمكن ايجاد قيمة الكتلة الفعلية السايكلترونية (المدارية) m_c^* .

3 - 12 - 6 الظاهرة الصوتية المغناطيسية

يمكننا الحصول على معلومات مباشرة عن الشكل الهندسي لسطح فيرمي وذلك عن طريق قياس توهين (attenuation) الموجات الصوتية في المعادن خلال انتشارها عموديا على مجال مغناطيسي منتظم وخاصة اذا كانت الموجة ناتجة عن ازاحة الايونات التي تكون عمودية على اتجاه انتشارها وعلى اتجاه المجال المغناطيسي المسلط عليها وكما في الشكل (6–21) .



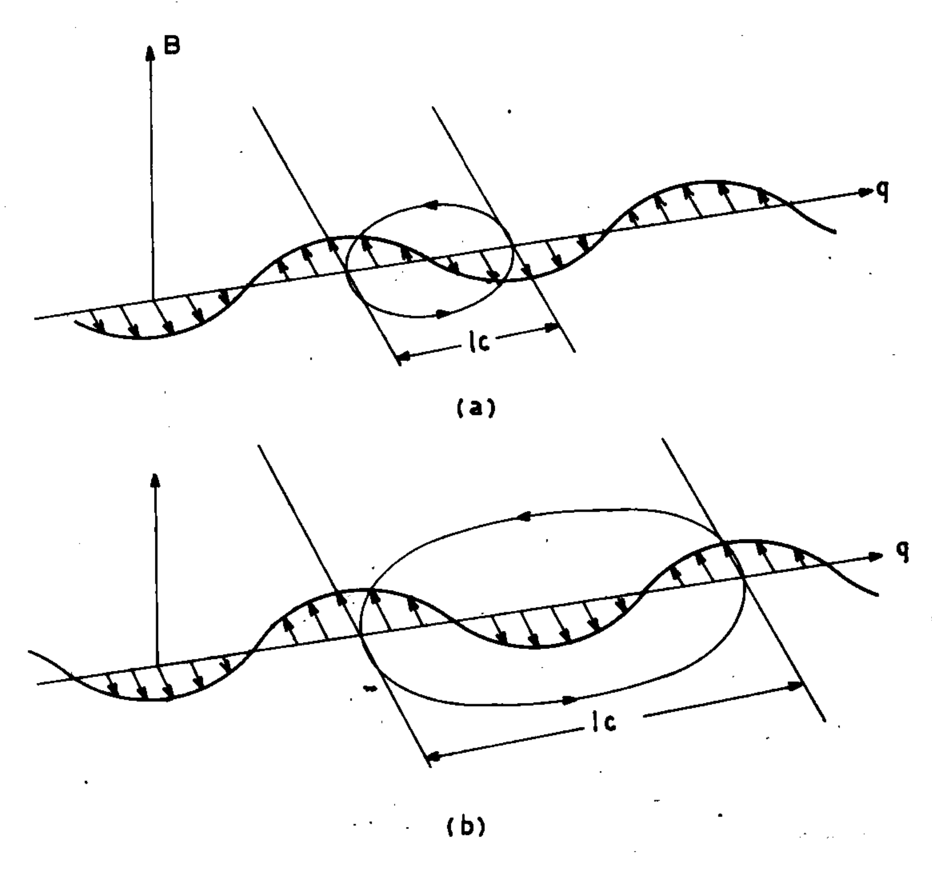
الشكل(21 - 6)الازاحة اللحظية للايونات عن مواقع توازنها

لما كانت هذه الايونات مشحونة كهربائيا ، فعليه فان الموجة تكون مصحوبة بمجال كهربائي له نفس التردد ومتجه الموجة والاستقطاب . ان الالكترونات في المعدن تتصادم مع الموجة الضوئية من خلال هذا المجال الكهربائي وعليه اما ان تكون معرقلة او مقوية لانتشار الموجة . اذا استطاع الالكترون ان يعمل عدة مدارات كاملة بوجود المجال المغناطيسي قبل تصادمه فان توهين الموجات الصوتية يعتمد على الطول الموجي بطريقة تعكس لنا الشكل الهندسي لسطح فيرمي .

عندما يقترب الطول الموجي للموجة الصوتية من ابعاد المدار الالكتروني فان تاثير المجال الكهربائي للموجة على الالكترون يعتمد على مدى تقارب طول الموجة l مع اقصى بعد خطي l_c للمدار باتجاه انتشار الموجة (l_c تمثل قطر مدار الالكترون) . عندما يكون الالكترون في مدار قطره يساوي نصف طول الموّجة (الشكل 6-22a) فان الالكترون يتعجل دائم (اويتباطأ دائما) خلال مداره الكامل بواسطة الموجة الصوتية . اما اذا كان قطر المدار مساويا الى طول موجة كاملة (الشكل 6-22b) فان الالكترون يتعجل دائما خلال جزء من مداره ويتباطأ في الجزء المتبقي من المدار . بصورة عامة . فان اقتران الالكترون بالموجة يكون ضعيفا عندما يساوي قطر مداره nl ويكون قويا عندما يساوي قطر مداره $\left(n + \frac{1}{2}\right) l$. اي

$$l_c = nl$$ اقتران ضعيف

$$l_c = \left(n + \frac{1}{2}\right) l$$ اقتران قوي ... (6-52)



الشكل (22 - 6)(a)مدار الـكتروني قطره l_c يساوي نصف طول الموجة الصوتية (b) مدار الكتروني قطره l_c يساوي طول الموجة الصوتية

تستطيع الالكترونات القريبة من سطح فيرمي ان تؤثر على توهين الموجات الصوتية وذلك لان مبدا الانفراد يمنع الالكترونات ذات الطاقات القليلة من تبادل كميات قليلة من الطاقة مع الموجة .

ان توهين والموجات الصوتية يتغير دوريا مع مقلوب الطول الموجي . وان الدورة تساوي مقلوب اقصى قطر لسطح فيرمي باتجاه انتشار الموجة . اي

$$\Delta \left(\frac{1}{l} \right) = \frac{1}{l_c} \qquad \dots (6\text{–}53)$$

وعليه فبتغير اتجاه انتشار الموجة (لنحصل على اقطار مختلفة) وبتغير اتجاه المجال المغناطيسي المسلط (لنحصل على مقاطع مختلفة من سطح فيرمي) ، نستطيع ان نستنتج شكل (سطح فيرمي) من ظاهرة توهين الموجات الصوتية .

4 - 12 - 6 ظاهرة دي هاز – فان الفن

قبل ان نتطرق الى هذه الظاهرة لابد من معرفة منشا التذبذب (oscillation) في بعض الخواص الفيزياوية عندما يكون المجال المغناطيسي عاليا جدا وان البلورة نقية جدا وعند درجات حرارة واطئة . عندما تكون المدارات الالكترونية closed orbit في مجال مغناطيسي موازيا للمحور z فان المدارات تكون دورية وبترددات ω_c . لقد لوحظ ان الطاقة مكممة بوحدات $\hbar\omega_c$ ، اي

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \qquad \ldots (6\text{-}53)$$

اي ان طاقة المدارات الالكترونية هي مجموع الطاقة المكممة للحركة الدوارانية في مستو عمودي على المجال والطاقة الانتقالية باتجاه المجال . لما كانت

$$\omega_c = \frac{eB}{m_c}$$

و

$$m_c = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{dA}{d\varepsilon} \qquad \ldots (6\text{-}54)$$

فعليه

$$\omega_c = \frac{2\pi eB}{\hbar^2} \frac{\partial \varepsilon}{\partial A} \qquad \ldots (6\text{-}55)$$

ان المعادلة (6-54) تتحقق عندما

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2\pi m_c} A_n$$

حيث A_n مساحة المدار n في فضاء k . ومن المعادلتين (6-53) و(6-56) نحصل على

$$A_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi eB}{\hbar} \qquad \ldots (6\text{-}57)$$

نستنتج من المعادلة (6-57) ان المساحة المدارية للالكترون هي مكممة ايضا في فضاء k وبوحدات $\frac{2\pi eB}{\hbar}$

ان السطوح التابعة للطاقة في المعادلة (6-53) هي دوائر في المستوي (x − y) وعند تسليط مجال مغناطيسي فان الحالات الجديدة لا تقع في اي نقطة منَ الدائرة ولكن تدور حول الدائرة وبتردد ω_c كما في الشكل (6-23) . يمكن تسمية المستويات الجديدة بوجود المجال المغناطيسي وذلك عند تحديد المدارات التي تتبعها تلك المستويات . ان هذه المستويات تسمى بمستويات لانداو (Landau levels) .
ان المساحة بين سطحي الطاقة التي تفصلهما طاقة قدرها $d\varepsilon$ هي

$$dA = \frac{2\pi m_c}{\hbar^2} d\varepsilon$$

وتكون مكممة . وعند زيادة قيمة المجال المغناطيسي المسلط فان مستويات لانداو تكبر وتترك سطح فيرمي وهذا يودي الى ظاهرة التذبذب في معظم الخواص الفيزياوية في المعادن كالمقاومة النوعية والحرارة النوعية .

وعند هذه الحالة فان

$$A_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{2\pi eB}{\hbar} = A_0 \qquad \dots (6-58)$$

حيث A_0 هي اقصى مساحة extremal area للمدار . لما كانت n كبيرة ($n \approx 10^4$) فعليه من المعادلة (6 - 58) نحصل على

$$n = \frac{F}{B}$$

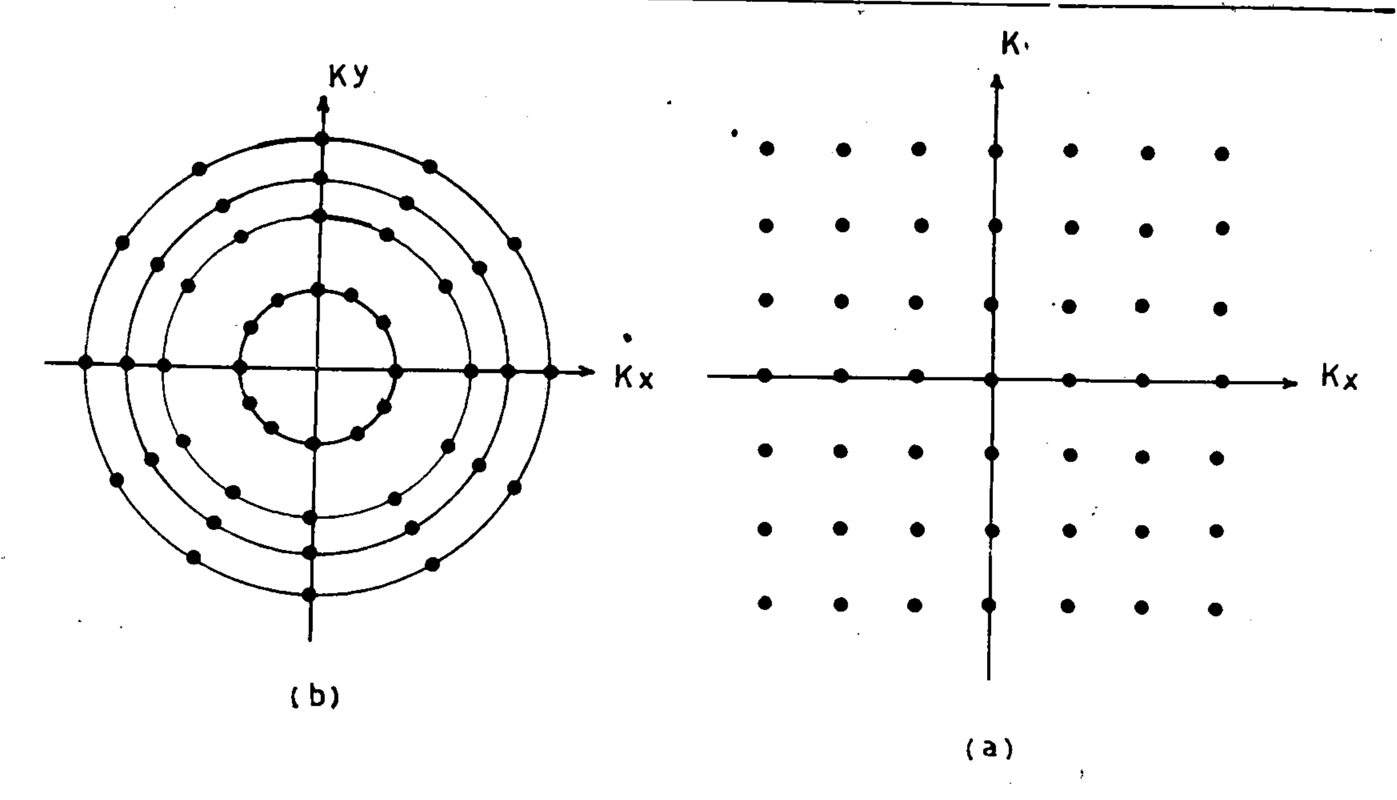
حيث

$$F = \frac{\hbar A_0}{2\pi e}$$

وتسمى تردد دي هاز– فان الفن .

ان العزم المغناطيسي μ (magnetic momentum) عند درجة حرارة الصفر المطلق ياخذ الصيغة التالية :

$$\mu = - \frac{\partial u}{\partial B}$$

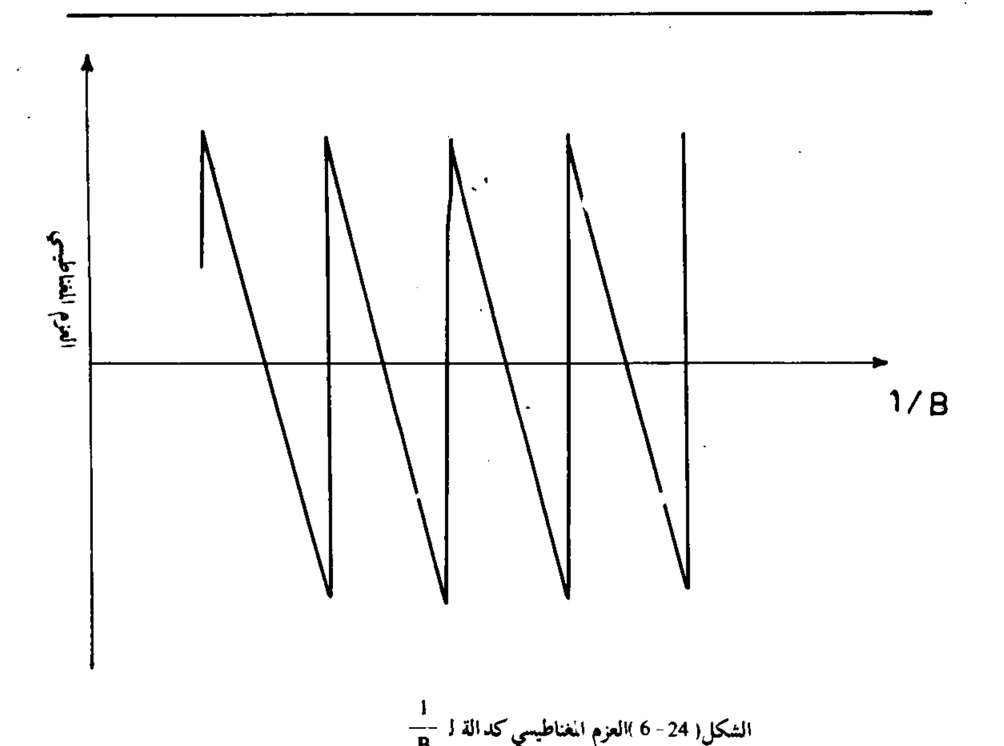


الشكل (6-23) توزيع الحالات في فضاء k (a) بغياب المجال المغناطيسي (b) بوجود المجال المغناطيسي.

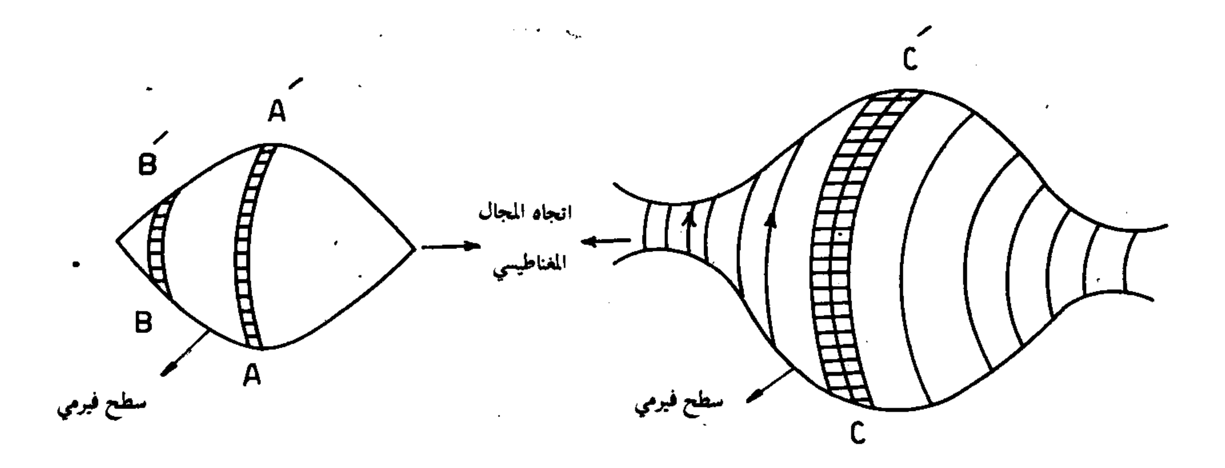
حيث μ تتذبذب مع $1/B$ كما في الشكل (24 - 6) . ان تذبذب العزم المغناطيسي عند تغير المجال وفي درجات الحرارة الواطئة يدعى ظاهرة دي هاز- فان الفن ان التذبذب يحصل بفترات متساوية من $1/B$ ، وعليه

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar A_n} \qquad \ldots (6-59)$$

حيث A_n تمثل اقصى مساحة لسطح فيرمي وتكون عمودية على اتجاه المجال المغناطيسي المسلط كما في الشكل (25 - 6) . من قياس $\Delta\left(\frac{1}{B}\right)$ يمكن الحصول على مساحة سطح فيرمي ومنها يمكن معرفة شكل وابعاد سطح فيرمي . ان تذبذب المقاومة مع المجال المغناطيسي تسمى ظاهرة دي هاز- شبنكوف
(de Haas - shubinkov effect)



الشكل (24 - 6) العزم المغناطيسي كدالة لـ $\frac{1}{B}$



الشكل(25 - 6)المدارات القصوى في سطح فيرمي (يكون التردد ثابت خلال AA′ ، CC′ ومتغير خلال الاجزاء الاخرى من سطح فيرمي)

الأسئلة

6 - 1 حدد مناطق بريلوين الاولى والثانية والثالثة لشبيكة مربعة ذات بعدين .

6 - 2 اذا كانت العلاقة بين ε و k تاخذ الصيغة التالية :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

برهن ان كثافة الحالة

$$\frac{dn_s}{d\varepsilon} = (2m^{*3})^{1/2}(\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2} / \pi^2\hbar^3$$

6 - 3 اذا علمت ان العلاقة بين ε و k تاخذ الصيغة التالية

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} - \frac{k_z^2}{m_z}\right)$$

حيث m_z , m_y , m_x ثوابت موجبة. بين ، عندما $\varepsilon = \varepsilon_0$ ،
فان مشتقة كثافة الحالة

$$\left(\frac{dn_s}{d\varepsilon}\right)^1 \approx \text{constant} \quad \text{عندما} \quad \varepsilon > \varepsilon_0$$

و

$$\left(\frac{dn_s}{d\varepsilon}\right)^1 = (\varepsilon_0 - \varepsilon)^{-1/2} \quad \text{عندما} \quad \varepsilon < \varepsilon_0$$

6 - 4 ناقش مفهوم الكتلة الفعلية في المواد الصلبة . برهن ان مقلوب الكتلة الفعلية هو كمية ممتدة للدرجة الثانية second order tensor . اذا علمت ان التعبير الرياضي للطاقة ، عند قعر حزمة التوصيل للبزموث ، ياخذ الصيغة التالية

$$\varepsilon = \frac{1}{2}\hbar^2(\alpha_{xx}k_x^2 + \alpha_{yy}k_y^2 + \alpha_{zz}k_z^2 + 2\alpha_{yz}k_yk_z)$$

اوجد مركبات ممتدة الكتلة الفعلية effective mass tensor

6 - 5 (a)احسب الترد د السايكلتروني ω_c لمناسيب الطاقة energy contour المعطاة :

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m_1^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2^*} k_y^2$$

حيث المجال المغناطيسي B عمودي على مستوى منسوب الطاقة .

(b) احسب التردد السايكلتروني ω_c لسطح الطاقة الاهليجي llipsoidal energy surface

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m_1^*}(k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_3^*} k_z^2$$

حيث المجال المغناطيسي B يعمل زاوية قدرها θ مع المحور z .

6 - 6 يمكن قياس الكتلة الفعلية *m لحامل التيار current carrier في شبه موصل بصورة مباشرة بواسطة تجربة رنين السايكلترون . ففي هذه التجربة تتحرك حاملات التيار (الالكترونات والفجوات) في مدارات حلزونية حول اتجاه مجال مغناطيسي خارجي $\vec{B}$.عند تسليط مجال كهربائي متناوب باتجاه عمودي على B يحصل امتصاص رنيني resonant absorption للطاقة من هذا المجال عندما يكون تردد المجال مساويا لتردد دوران الحاملات ν_c (a). اشتق معادلة لـ ν_c بدلالة *B , e , m (b). اذا كانت $B = 0{\cdot}1T$ وان اقصى امتصاص يحصل عند $\nu = 1{\cdot}4 \times 10^{10}$ Hz جد *m (c) جد القيمة العظمى لنصف قطر مدار حامل التيار في هذه التجربة اذا كانت سرعته تساوي 3×10^4 م / ثانية

6 - 7 قارن بين توزيع الطاقات لالكترونات التوصيل في المعدن في فضاء k

(a) بغياب المجال المغناطيسي

(b) عند تسليط مجال مغناطيسي عال .

ثم بين منشا ظاهرة تذبذب الخواص الفيزياوية للمعادن عند درجات الحرارة الواطئة وبوجود مجال مغناطيسي عال .

جد عدد مستويات لانداو المشغولة في الصوديوم عند تسليط مجال مغناطيسي يساوي 10 تسلا (طاقة فيرمي للصوديوم تساوي $5{\cdot}2 \times 10^{-19}$ جول والكتلة الفعلية السايكترونية $(m_c^* = 1{\cdot}38\, m_0)$

6 - 8 ان العزم المغناطيسي للذهب يتذبذب بوجود المجال المغناطيسي وبدورة 2×10^{-5} م^2/وبر. احسب اقصى مساحة لسطح فيرمي للذهب تعود الى ذلك التذبذب .

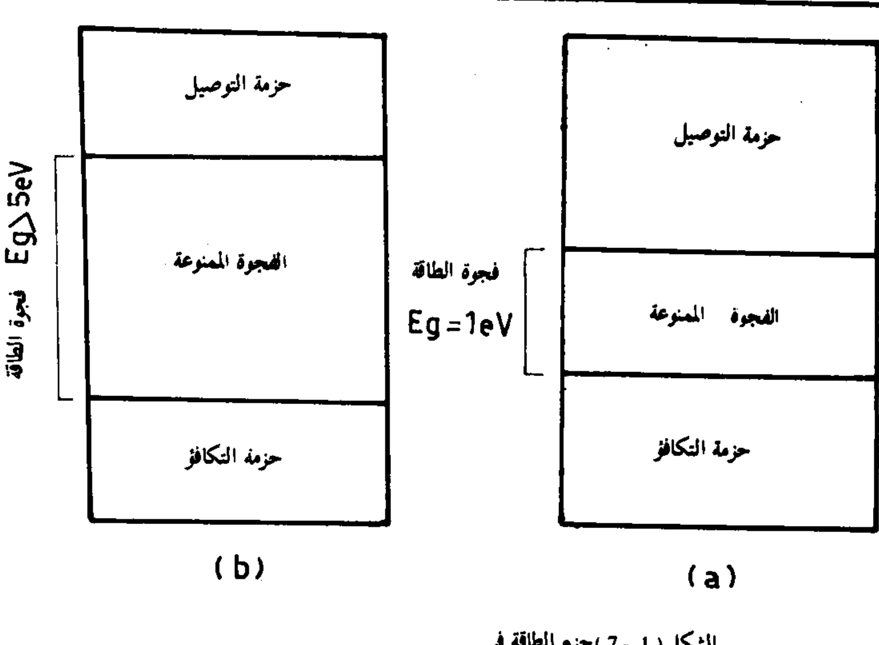
عندما يكون المجال المسلط بالاتجاه (111) هناك تذبذب اخرويدورة 6×10^{-4} م٢ / وبر . احسب مساحة اقصى مدار الكتروني في هذه الحالة . ما الفرق بين مساحتي هذين المدارين ؟

الفصل السابع

اشباه الموصلات

1 - 7 المقدمة : -

تعرف اشباه الموصلات بانها مواد عازلة عند درجات الحرارة المنخفضة ولكنها تمتلك قدرا معينا من التوصيلية الكهربائية عند ارتفاع درجة حرارتها . وطبقا لنظرية الحزم في المواد الصلبة فان هناك حزمتين احداهما مملوءة تماما بالالكترونات والاخرى فارغة تماما منها وتفصل بينهما فجوة طاقة تدعى بفجوة الطاقة الممنوعة (forbbiden energy gap) ان عرض فجوة الطاقة هذه في اشباه الموصلات تختلف عما هو عليه في العوازل (انظر الشكل 1 - 7) فهي تكون صغيرة نوعا ما بحيث ان تغيرا محسوسا في درجة حرارة شبه الموصل يمكن ان يؤدي الى اثارة الالكترونات في الحزمة المملوءة بها (حزمة التكافؤ Valance Band) وانتقالها عبر فجوة الطاقة الى الحزمة الفارغة (حزمة التوصيل Conduction Band)ومع ان اشباه الموصلات تصبح قادرة على التوصيل الكهربائي عند ارتفاع درجة حرارتها مما يوحي الى القاريء بانها تحولت الى مواد موصلة الا ان هذا غير صحيح ذلك لان اشباه الموصلات تختلف عن هذه الاخيرة بامتلاكها مقاومة ذات معامل حراري سالب اي



الشكل (1 - 7) حزم الطاقة في
a- اشباه الموصلات b- العوازل

ان مقاومتها تقل بصورة عامة مع ارتفاع درجة حرارتها بينما تزداد مقاومة المواد الموصلة عند ارتفاع درجة الحرارة . ان هذه القاعدة للتميز بين الموصلات واشباه الموصلات على اية حال ، غير ملائمة ذلك لانه وجد وفي مدى معين من درجات الحرارة : ان مقاومة اشباه الموصلات تزداد هي الاخرى بزيادة درجات الحرارة خصوصا عندما تحتوي هذه المواد على كمية مناسبة من الشوائب كذلك وجد انه عند رفع درجة الحرارة اكثر فان مقاومة اشباه الموصلات الشائبة هذه ، وعند درجة حرارية معينة ، تبدا مرة اخرى بالنقصان وبشكل كبير ويستمر هذا النقصان مع ارتفاع درجة الحرارة . لذا فانه يصح القول على ان اشباه الموصلات النقية فقط هي التي تمتلك مقاومة ذات معامل حراري سالب .

ولاعطاء فكرة ما عن قيمة المقاومة لكل من الموصلات واشباه الموصلات والعوازل يمكن القول انه عند درجات الحرارة الاعتيادية ، غير تلك الدرجات الحرارية القريبة من درجة الانصهار للمواد الشبه الموصلة ، فان الموصل الجيد يمتلك مقاومة نوعية قدرها 10^{-6} اوم – سم بينما تتراوح مقاومة اشباه الموصلات بين 10^{-3} – 10^{6} اوم – سم بينما يمتلك العازل الجيد مقاومة نوعية في حدود 10^{21} اوم – سم .

ومع ان هناك الكثير مما يمكن قوله بخصوص اشباه الموصلات نتيجة للبحوث المكثفة على هذه المواد خلال الاربعين سنة الماضية الا اننا سنكتفي هنا بتلخيص اهم الخواص الرئيسية لهذه المواد ومنها :

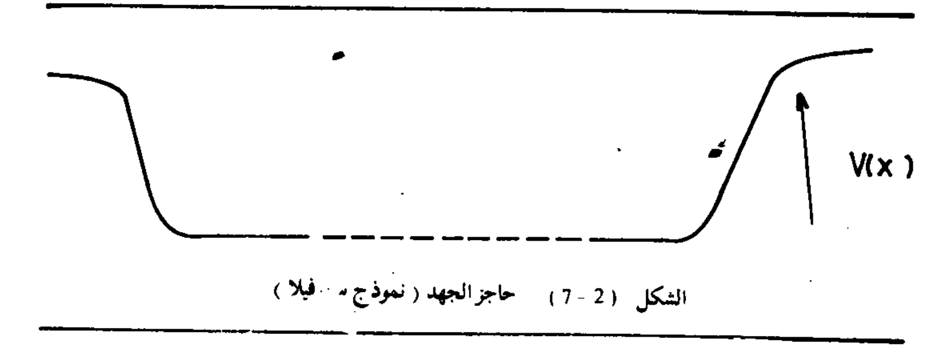
1 - امتلاكها مقاومة ذات معامل حراري سالب
2 - تتراوح قيمة مقاومتها بين $10^{-3} - 10^{6}$ اوم - سم
3 - القدرة الكهربائية - الحرارية التي يمكن ان تولدها هذه المواد تكون عالية اذا ما قورنت بتلك التي تنتج عن المعادن
4 - تمتلك نوعين من حاملات الشحنات : الفجوات والالكترونات خلافا لما عليه الحال في المعادن حيث تكون حاملات الشحنات هي الالكترونات فقط .
5 - تظهر حساسية للضوء عند تعرضها له وذلك من خلال الظاهرة الكهروضوئية اومن خلال التغير في مقاومتها .
6 - يمكن تقليل مقاومتها الكهربائية كاضافة شوائب ذات ذرات ثلاثية او خماسية التكافؤ .

2 - 7 النظريات الاولية لاشباه الموصلات

لقد تم اجراء الكثير من التجارب العملية على اشباه الموصلات قبل وضع اي نظرية مقنعة للتعريف بخصائص هذه المواد . لم يكن هذا غريباً اذا علمنا ان هذه النظرية اعتمدت اساساً على ميكانيك الكم بصيغة الميكانيك الموجي للتعريف بهذه الخصائص . هذه النظرية قد تم وضعها من قبل الباحث ولسون (A. H. Willson) في سنة 1931 . فكان من غير الممكن حتى وقت ظهور هذه النظرية اعطاء تعريف مقنع لاشباه الموصلات

ان اول تطبيق لميكانيك الكم على حركة الالكترونات في المواد الصلبة كان لمعالجة التوصيل الالكتروني في المعادن بواسطة سمر فيلد (A. Sommerfield) . إن الفرق الاساس بين هذه المعالجة والمعالجة السابقة التي كانت تعتمد على النظريات الكلاسكية . هو ان مستويات الطاقة التي تستطيع الالكترونات العديدة احتلاها أصبح حسابها بواسطة الميكانيك الكمي . كذلك تم فرض ان الالكترونات الخارجية في المعادن والتي تعرف بالكترونات التكافؤ - نظراً لانها تشارك في الترابط الكيمائي . ليست مرتبطة الى ذرات معينه ولكنها تمتلك الحرية للتحرك خلال المادة الصلبة أي

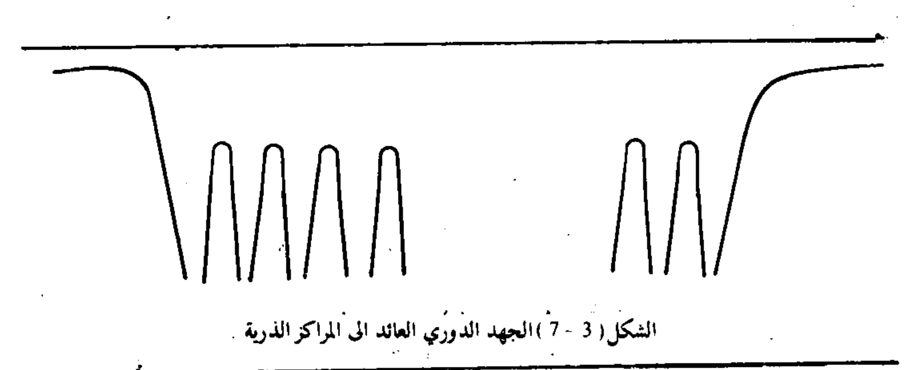
انها تتحرك في فضاء خال من الجهد ذلك هو ان تأثير قوى المجال العائدة الى المراكز الذرية أو الالكترونات الاخرى على حركة هذه الالكترونات يمكن ان تكون مهملة الا عند الحدود لهذه المواد اي عند سطوح هذه المواد) انظر الشكل (2 - 7) . هذه القوى يفترض فيها ان تجذب الالكترونات بقوه اذا ما تحركت خارج الحدود. وابسط صيغة لهذه النظرية هو افتراضها وجود حاجز جهد غير قابل للاختراق ويقيد حركة الالكترونات داخل المواد الصلبة .



الشكل (2 - 7) حاجز الجهد (نموذج سمرفيلد)

ان نظرية سمرفيلد لم تغير بشكل جوهرى فكرة التوصيل الالكتروني في المعادن الاانها اعطت تفسيراً عن سبب المساهمة الصغيرة جداً لهذه الالكترونات للحرارة النوعية للمواد . اضف الى ذلك ان الافتراض القائل بوجود الكترونات حرة تماما أي لاتعاني من اصطدامات مع الذرات أو لالكترونات الاخرى خلال تحركها في المعادن هو غير صحيح الى حد كبير. أكثر من هذا فأن هذه النظرية لم تتعرض الى الفرق بين خواص المعادن واشباه الموصلات وكذلك العوازل كان الاعتقاد السائد ان الكترونات التكافؤيمكن فصلها بسهولة من ذرات المعادن المنفردة بينما تكون مرتبطة بقوة الى ذرات المواد العازلة . الا انه وجد ان الطاقة اللازمة لفصل الالكترون في جميع الذرات هي واحدة عدا كونها في بعض المعادن أكبر مما هي عليه في المواد غير المعدنية ، فعلى سبيل المثال تكون هذه الطاقة 9.2 الكترون – فولت في الذهب بينما هي مساوية الى 8.09 الكترون – فولت في الجرمانيوم . والان اصبح واضحاً ان هناك حاجة الى نظرية أكثر دقة من نظرية سمرفيلد للالكترون الحر وكانت الخطوة التالية هي الاخذ بنظر الاعتبار تفاعل الكترونات التكافؤ مع مراكز الذرات . مفترضين أن هذه الاخيرة تقع على انقاط الشبيكة في البلورة كذلك نفترض ان هذه الالكترونات لاتزال

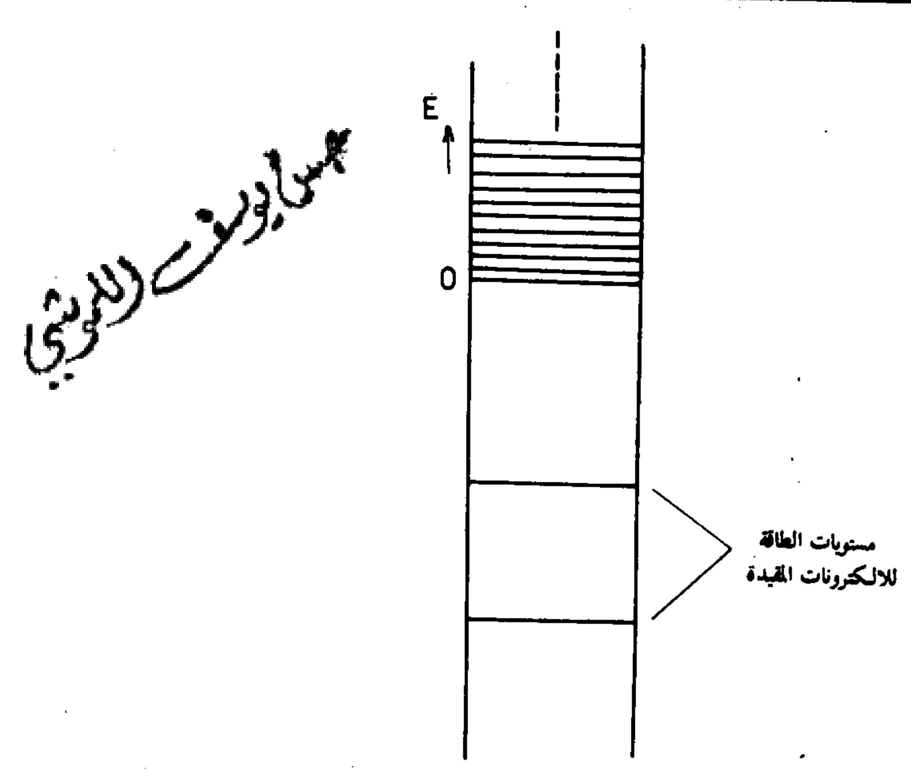
تتحرك بصورة مستقلة ولكن الجهد المستخدم بواسطة سمرفيلد قد استبدل بأخر ذي صيغة يوضحها الشكل (3 - 7) .



الشكل (3 - 7) الجهد الدوري العائد الى المراكز الذرية .

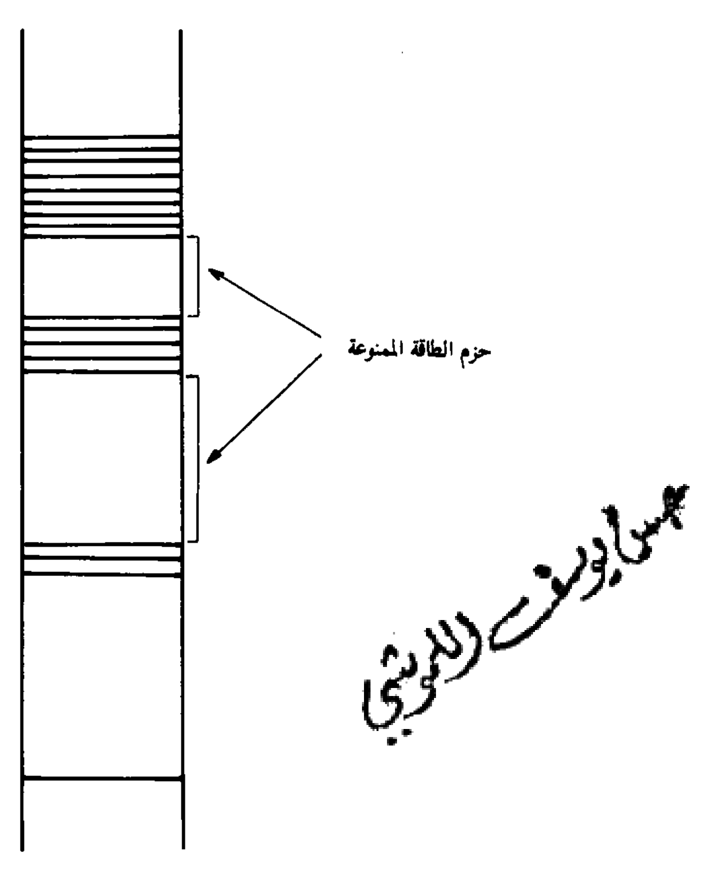
الصفة المميزة لهذا الجهد هي الدورية حيث انه يمتلك نفس الصفة الدورية للشبيكة البلورية وان حركة الالكترونات في مثل هذا الجهد قد نوقشت من قبل بلوخ (F. Bloch) بالاستعانة بميكانيك الكم (راجع الفصل السادس) وبهذا فأن معظم النتائج الاساسية قد ظهرت لتغير تماما كيفية التعامل مع طبيعة التحرك الالكتروني في المواد الصلبة البلورية وكانت النتيجة أن هذه الحركة هي غير معتمده على الشكل الخاص بالجهد البلوري بذلك تم التوصل الى انه في الشبيكة المثالية الدورية يمكن للالكترون ان يتحرك بحرية ولايتشتت من قبل ذرات الشبيكة المنفردة ولايحدث الانحراف الابوجود الشوائب ومع ان هذا الافتراض يتفق مع نموذج سمرفيلد من عدة وجوه وخصوصاً للمعادن الا انه يبقى هناك اختلاف اساس بين نموذج بلوخ وسمرفيلد ذلك هو أن طول المسار الحر الذي يسلكه الالكترون يحدد فقط بواسطة العيوب في البلورة ويكون غير محدود في البلورات المثالية . على العموم يكون طول هذا المسار أكبر بكثير من طول الثابت الشبيكي وعليه فأن الالكترون سوف يمر بعدد من الذرات قبل أن يصطدم .

على اي حال . في نظرية سمرفيلد تكون مستويات الطاقة المسموحة لالكترونات التكافؤ في البلورة ذات الابعاد التي ترى بالعين المجردة قريب بعضها من البعض الاخر وتمتد من قاعدة بئر الجهد الذي تتحرك فيه الالكترونات الى الاعلى وبصورة غير محدده . أما بالنسبة للالكترونات الاخرى فان مستويات طاقتها تبقى غير متأثره وانما تمثل المستويات الذرية العادية . هذا الحال هو واحد لكل الذرات وعليه فان هناك (N) من المستويات اذا وجد N من الذرات في البلورة انظر الشكل (4 - 7) . أما في حالة وجود جهد



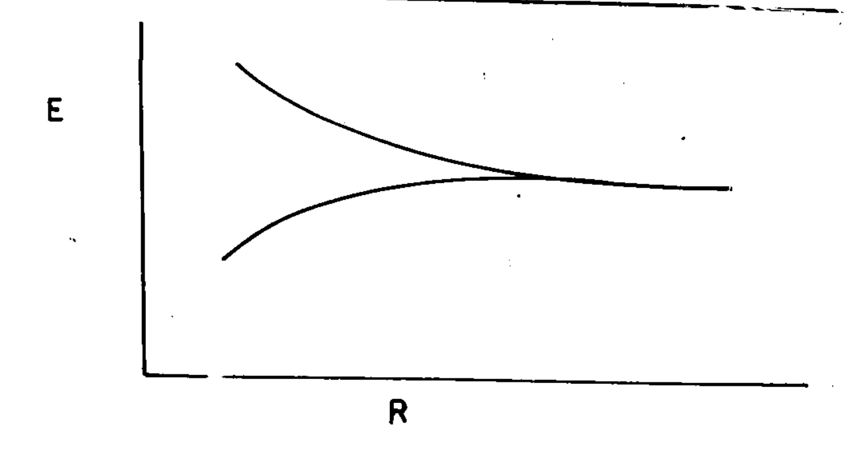
الشكل (4 - 7) مستويات الطاقة المسموحة لانموذج سمرفيلد للمعادن (طاقة الصفر اخذت كطاقة الـكترون تكافؤي حر بطاقة حركية تساوي صفر) .

دوري (نظرية ولسون) فأن مستو يات الطاقة المسموحة سوف تقتصر على حزم طاقة معينة تفصل بينها مناطق تدعى بمناطق الطاقة الممنوعة . تكون حزم الطاقة المسموحة للالكترونات الداخلية ضيقة جداً وتكافىء المستويات الذرية اما بالنسبة لالكترونات التكافؤ فان هذه الحزم تكون عريضة الى حد كبير . الشكل (5 - 7) يوضح ترتيب مستويات الطاقة في هذه الحزم . كل حزمة تتكون من عدد كبير من المستويات المتراصفة والمنفصلة عن بعضها . ولاسباب عديدة يمكن اعتبار الحزمة مستمرة . عندما يراد تعيين مواقع الالكترونات على هذه المستويات فيجب أن نتذكر أن أياً من هذه الالكترونات له صفات متفردة وكذلك ان هناك عدداً محدوداً من هذه الالكترونات وكما هو علية الحال في الذرات الثقيلة نجد أن المستويات الداخلية تكون مملوءه وبهذا فان كل المستويات في الحزم السفلي المسموحة تكون مملوءه اما حزم الطاقة العليا المسموحة فانها اما تكون مملوءه تماماً أو تكون مملوءه جزئياً بالالكترونات .



الشكل (5-7) مستويات الطاقة المسموحة للشبيكة البلورية

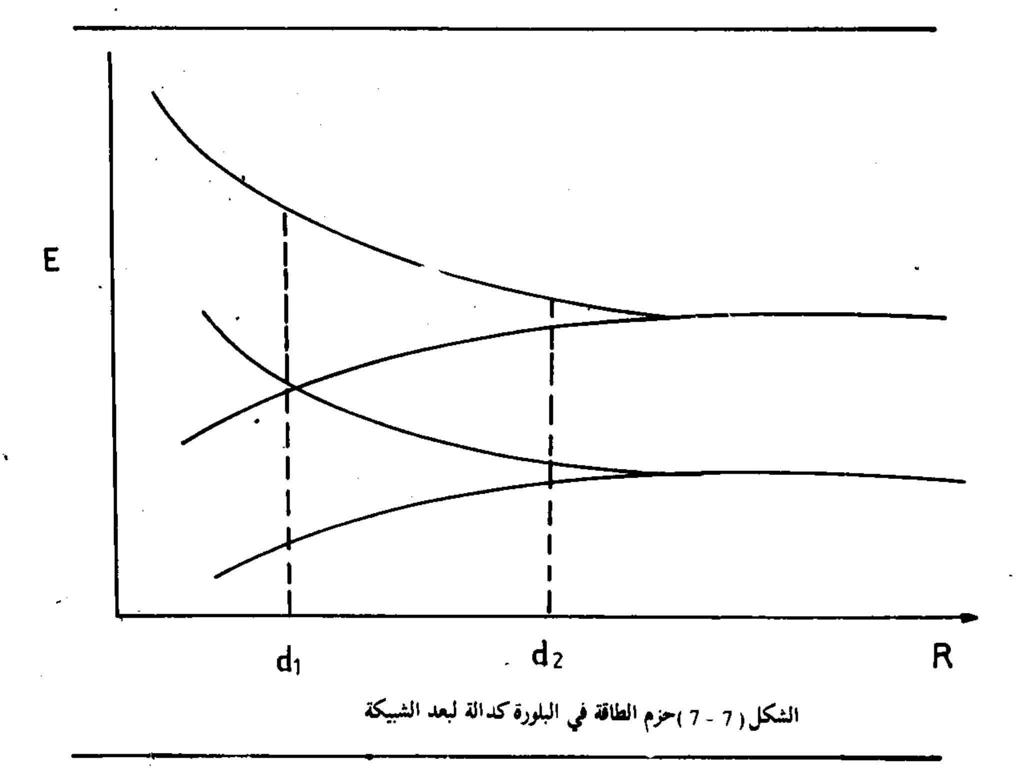
بالامكان الوصول الى صورة حزمة الطاقة بطريقة أخرى . افترض أن لدينا ذرتين بعيد تين عن بعضهما وتحتوي كل منهما على مستوى طاقة واحد . المستويات المسموحة لهذا النظام يتكون من مستوى منفرد ولكنة مكرر ، أي ان كل الكترون في أي من الذرتين سوف يمتلك نفس الطاقة بالضبط . اذا افترضنا الان أن مثل هاتين الذرتين اقتربتا من بعضهما فان هذا المستوى سوف ينشطر الى مستوين وذلك نتيجة التفاعل بين الذرتين ويزداد هذا الانشطار كلمااقتربت الذرتان من بعضهما (الشكل 6 - 7) . فاذا كان لدينا الان N من الذرات كما هو عليه الحال في البلورة ، وافترضنا أن البلورة



الشكل(6 - 7) انشطار مستوى الطاقة بسبب تفاعل ذرتين

أمتدت بحيث أن ثابت الشبيكة أصبح كبيراً فان مستويات الطاقة أنذاك سوف تكون هي نفسها المستويات الذرية ، وحيث أن كل ذرة تمتلك مستوى طاقة خاص بها فاننا نتوقع وجود N من المستويات لهذه البلورة تحتوي على الالكترونات ذات الطاقات المتماثلة . اما اذا ماقللنا المسافات بين الذرات فان كل مستوى من هذه المستويات سوف ينشطر الى N من المستويات المنفصلة تحت تأثير الذرات على بعضها البعض الاخر لذا فانه يتكون لدينا حزمة من الطاقة تتكون من N من المستويات المنفصلة بدلا من مستوى واحد منفرد متكرر في كل ذرة انظر الشكل (7 - 7) تكون المستويات الداخلية متقاربة جدا وذلك لان تأثير الذرات على بعضها الاخر يكون صغيراً جداً مقارنة مع قوة التجاذب بين الالكترونات الواقعة في هذه المستويات والنواة . من جهة اخرى فان انشطار المستويات العائدة الى الكترونات التكافؤ يكون كبيرا وفي الحقيقة فان المستويات المتجاورة تتداخل فيما بينها (الشكل 7 - 7). في هذه الحالة تكون طاقة الالكترونات مستمرة . اما عندما تكون حزم الطاقة غير متداخلة فان المسافات الفاصلة بين هذه الحزم تمثل الطاقات الممنوعة للالكترونات وتدعى بحزم الطاقة الممنوعة

لنأخذ الحالة عندما لايكون هناك تداخل بين الحزم،علينا أن نقرر الان كيف نسب الالكترونات المتعددة الى هذه الحزم طبقاً لمبدأ الانفراد لباولي . بامكاننا وضع الكترونين لكل مستو أحد الالكترونين ذو برم 2 / 1 + والاخر ذو برم 2 / 1- . خذ حالة



الشكل (7 - 7)حزم الطاقة في البلورة كدالة لبعد الشبيكة

الالكترونات الداخلية ، كل ذرة تحتوي على الكترونين في هذا المستوى لذا فان هناك من الالكترونات يلزم تعين مواقعهما في الحزمة . هذا العدد 2N يملأ تماما الحزمة ذات الـ N مستوى ، ذلك لان كل الكترونين يحتلان مستوى واحداً وعليه فان الحزم المكافئة للمستويات الذرية التي تحتوي كل منها على زوج من الالكترونات ذات البرمين المتعاكسين تكون مملوءه تماما . مره أخرى تكون الحزم المكافئة للقشرات المغلقة أي تلك القشرت الذرية التي تحتوي على اعداد كاملة من الالكترونات. مملوءه هي الاخرى تماماً بينما نرى أن الحزم العائدة الى القشرات الخارجية أو الكترونات التكافؤ تكون مملوءة جزئياً ولحالات التهيج الذري هناك حزم طاقة عليا تكون فارغة بصورة عامة .

بامكاننا الان ان نرى لماذا لاتشارك الالكترونات في الحزم الداخلية في عمليـة التوصيل الكهربائي حيث يلزمها امتلاك الطاقة الكافية (من مجال كهربائي مثلا) . اي يجب ان ترفع الى مستوى اعلى . فاذا كانت كل المستويات في الحزمة مشغولة فان هذا الانتقال لايمكن حدوثه ما لم يثار الالكترون الى الحزم الاعلى حيث توجد اماكن فارغة وحيث ان احتمالية حدوث مثل هذا الانتقال قليلة جدا نظرا لما يلزم الالكترون مـــن

طاقة كبيرة لذا فاننا نجد ان هذه الالكترونات لايمكنها المساهمة في التوصيل الكهربائي الافي حالة وجود مستوى فارغ مجاور يمكن ان تنتقل اليه وبهذا فان الحزم المملوءة لا تساهم في التوصيل الكهربائي على الرغم من ان بلوخ قد اوضح ان الالكترونات هي حرة في التحرك خلال البلورة الخالية من العيوب

مما جاء اعلاه يتضح لنا ان الخواص الكهربائية للمواد الصلبة تتحدد على ضوء تركيب حزم طاقاتها ومدى انشغالها بالالكترونات ويمكن فهم ذلك بالرجوع الى البند (6 - 2) لتوضيح الفروق الاساسية بين التوصيل الكهربائي لكل من الصوديوم والماس والسيلكون .

3 - 7 اشباه الموصلات الذاتية : -

سبق ان ذكرنا ان الاختلاف في خواص اشباه الموصلات النقية والعوازل يعود الى الفرق في مقدار عرض طاقة الفجوة (E_g) . كذلك رأينا ان في اشباه الموصلات الذاتية (Intrinsic Semiconductor) (تدعى اشباه الموصلات النقية باشباه الموصلات الذاتية) والعوازل وعند درجة حرارة الصفر المطلق تكون حزمة التكافؤ مملوءة تماما بينما تكون حزمة التوصيل فارغة تماما . لكن اذا رفعت حرارة المادة الى اكثر من درجة حرارة الصفر المطلق ، فان عدداً معينا من الالكترونات في قمة الحزمة المكافئة يمكن ان تثار حراريا وتنتقل الى حزمة التوصيل . هذه الالكترونات التي وصلت الى حزمة التوصيل ستملأ هذه الحزمة جزئيا وستكون جاهزة للتوصيل عند تسليط المجال الكهربائي . اما حزمة التكافؤ التي كانت مملوءة تماما عند درجة الصفر المطلق فانها تصبح مملوءة جزئياً حيث تتولد فجوات عند قمة هذه الحزمة . ان وجود مثل هذه الحالات الخالية (تدعى بالفجوات) في حزمة التكافؤ يؤدي الى التوصيلية الكهربائية ، حيث ان الالكترونات في هذه الحزمة سيكون باستطاعتها الانتقال الى هذه الفجوات عند تسليط المجال الكهربائي وبهذا فانها تكتسب سرعة تدعى بسرعة الانسياق (drift velocity) . لحساب التوصيلية الكهربائية لهذه المواد عند درجة حرارية معينة وبوجود مجال كهربائي فان الالكترونات سوف تنساق باتجاه معاكس الى اتجاه المجال وتحمل صافي تيار كهربائي . فاذا كان n هو عدد الالكترونات الحرة لوحدة الحجوم و $< v_e >$ هو معدل سرعة الانسياق لهذه الالكترونات نجد ان كثافة التيار في حزمة التوصيل هي

$$J_e = ne < v_e > \qquad \ldots (7-1)$$

لوحظ ان J_e هي موجبة ذلك لان كلا من $< V_e >$, e و هما سالبتان . عـلى الاساس نفسه فان كثافة التيار J_h بسبب من حركة الفجوات في حزمة التكافؤ يمكن ان تكتب بدلالة معدل سرعة الانسياق $< V_h >$. ذلك هو

$$J_h = PeV_h \qquad \dots (7-2)$$

حيث يمثل p عدد الفجوات الموجبة في حزمة التكافؤ . وبما ان معدل السرعة لـكل من الفجوات والالـكترونات يرتبط مع المجال الـكهربائي المسلط بمعادلة التحركية (mobility) ، ذلك هو ان

$$< V_h > = \mu_h \varepsilon \qquad \dots (7-3)$$
$$< V_e > = \mu_e \varepsilon$$

لذا فان المعادلتين (7-1) , (7-2) بعد التعويض عن $< V_e >$, $< V_h >$ فيهما ، تصبحان

$$J_e = ne\mu_e \varepsilon \qquad \dots (7-5)$$
$$J_h = pe\mu_h \varepsilon \qquad \dots (7-6)$$

وبما ان كثافة التيار الـكلي (J) ، في شبه الموصل تساوي المجموع الـكلي لـكثافة التيار العائد الى كل من الالـكترونات والفجوات . لذا فان J سوف تكـون : -

$$J = J_e + J_h = (ne\mu_e + pe\mu_h) \varepsilon \qquad \dots (7-7)$$

وعند مقارنة المعادلة اعلاه بقانون اوم :

$$J = \sigma \varepsilon \qquad \dots (7-8)$$

نحصل على

$$\sigma = (ne\mu_e + pe\mu_h) \qquad \dots (7-9)$$

المعادلة اعلاه تمثل معادلة التوصيلية الـكهربائية الـكلية لشبه الموصل . في حالة شبه الموصل الذاتي فان n = p وان المعادلة (7-9) تصبح

$$\sigma = ne (\mu_e + \mu_h) \qquad \dots (7-10)$$

4 - 7 تركيز الحاملات في اشباه الموصلات الذاتية : –

تشير المعادلة (10 – 7) الى ان التوصلية الـكهربائية لاشباه الموصلات الذاتية – أو في كل اشباه الموصلات – تعتمد على عدد كل من الفجوات والالـكترونات لوحدة الحجوم في حزمتي التكافؤ والتوصيل على التوالي وكذلك على حركية هذه الحاملات للتيار . سنقوم الان بحساب عدد الالـكترونات n في حزمة التوصيل ولـكن قبل ان نناقش مشكلة حساب هذا العدد احصائياً ، سنفترض نموذجاً مبسطاً لتمثيل شبه الموصل الذاتي . هذا النموذج سيساعدنا على تقدير موقع مستوى فيرمي (Fermi level) في التركيب الحزمي لشبه الموصل والذي سيعطينا بدوره فكـرة مقربـة عن عـدد الالـكترونات في حزمة التوصيل .

a- النموذج المبسط : –

في الشكل (8 – 7) ، نفترض ان عرض كل من حزمتي التوصيل والتكافؤ صغير مقارنة مع عرض فجوة الطاقة الممنوعة . كذلك نفترض ان كل الالـكترونات في حزمة التوصيل تمتلك الطاقة E_c نفسها وان كل الـكترونات حزمة التكافؤ تمتلك الطاقة E_V نفسها فاذا اعتبرنا ان n تمثل عدد الالـكترونات في حزمة التكافؤ عند درجة حرارة الصفر المطلق ، فان n هذه عند اي درجة حرارية اعلى من درجة حرارة الصفر المطلق سوف تساوي عدد الالـكترونات المثارة حرارياً والمنتقلة الى حزمة التوصيل n_c زائداً عدد الالـكترونات المتبقية في حزمة التكافؤ n_V ، ذلك هو :

$$n = n_c + n_V \qquad \dots (7-11)$$

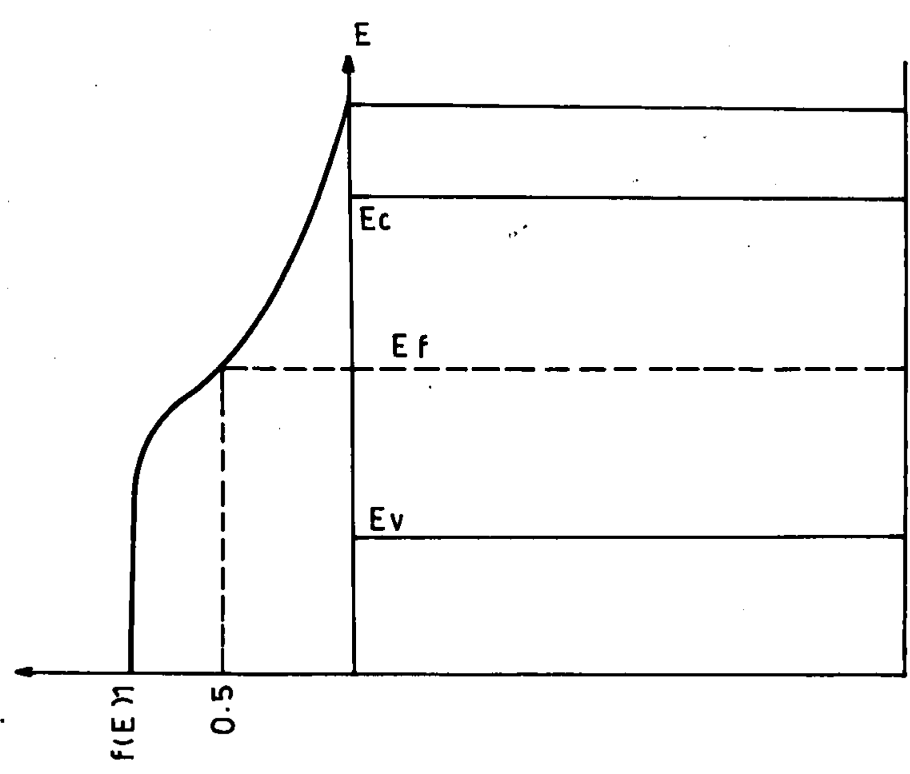
وبهذا فان عدد الالـكترونات في حزمة التوصيل سوف يكون

$$n_c = nf(E_c) \qquad \dots (7-12)$$

حيث تمثل $f(E_c)$ مقدار الاحتمالية التي يمتلكها الالـكترون ليحتل مستوى الطاقة E_c في حزمة الطاقة

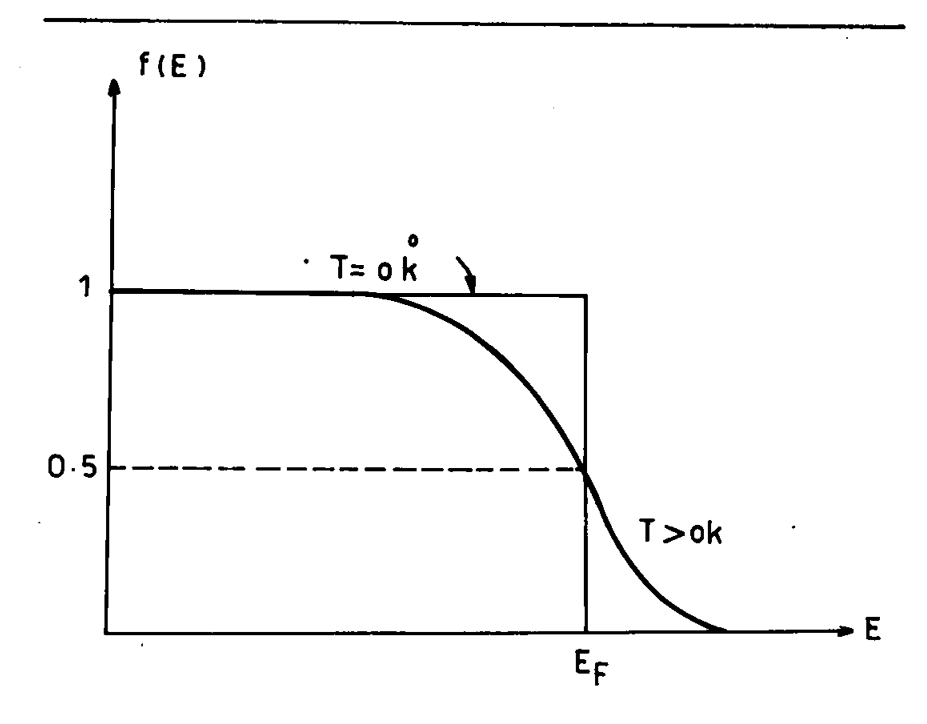
وتدعى الدالة $f(E)$ بدلالة توزيع فيرمي – ديراك ويمكن حسابها من

$$f(E) = (e^{(E-E_F)/K_BT} + 1)^{-1} \qquad \dots (7-13)$$



الشكل(8 - 7) مخطط حزم الطاقة لاشباه الموصلات

حيث تمثل E_F طاقة فيرمي ، K_B ثابت بولتزمان و T درجة الحرارة المطلقة الشكل (9 - 7) يمثل الدالة $f(E)$. يلاحظ من الشكل انه عند $T = 0$ فان $f(E)$ تساوي واحداً لكل الطاقات $E = E_F$ بينما تساوي صفرا لكل الطاقات $E > E_F$. وبهذا فان جميع الحالات التي تقل طاقاتها من E_F تكون مملوءة بينما تكون جميع الحالات التي تزيد طاقاتها عن E_F شاغرة . كذلك يلاحظ انه عند ارتفاع درجة الحرارة فان دالة التوزيع تبدأ بالاستدارة وتمتد وراء E_F والذي يعني ان الحالات التي تقع عند K_BT وتقل طاقاتها عن E سوف تكون هذه المرة شاغرة جزئيا بينما تكون الحالات عند K_BT والتي طاقاتها اكبر من E_F مملوءة جزئياً . على اية حال عندما تكون $E = E_F$ فان $f(E) = 1/2$ بغض النظر عن درجة الحرارة ، ذلك هو ، ان احتمالية احتلال مستوى فيرمي هي دائما تساوي



الشكل(9 - 7) دالة التوزيع F (E)

النصف ، وعليه فان مستوى طاقة فيرمي اومستوى فيرمي هو ذلك المستوى الذي تكون احتمالية احتلاله بواسطة اي الكترون عند $T > 0$ هي $\frac{1}{2}$
وبالتعويض عن $f(E_c)$ في المعادلة (12 - 7) نحصل على

$$n_c = \frac{n}{[\exp(E_c - E_F)/K_BT] + 1} \quad \dots (7-14)$$

وبنفس الطريقة يمكن كتابة

$$n_v = \frac{n}{[\exp(E_v - E_F)/K_BT] + 1} \quad \dots (7-15)$$

وحيث ان $n = n_c + n_v$ عليه فان

$$n = n[\exp(E_c - E_F)/K_BT + 1]^{-1} + n[\exp(E_v - E_F)/K_BT + 1]^{-1} \quad \dots (7-16)$$

أو

$$1 = [\exp(E_c - E_F)/K_BT + 1]^{-1} + [\exp(E_V - E_F)/K_BT + 1]^{-1} \quad ...(7-17)$$

وبعد التبسيط نحصل على

$$E_F = \frac{E_c + E_1}{2} \quad ...(7-18)$$

تشير المعادلة (18 - 7) الى ان مستوى طاقة فيرمي E_F في هذا النموذج المبسط تقع في منتصف المسافة بين حزمتي التكافؤ والتوصيل وان موقعها لايعتمد على درجـــة الحرارة .

في اشباه الموصلات الذاتية والعوازل يتراوح عرض طاقة الفجوة مابين 0·1 - 10 الـكترون - فولت وحيث ان $K_BT = \frac{1}{40}$ الـكترون - فولت عند درجة حرارة الغرفة ، لذا فان $E_c - E_F >> K_BT$ وبهذا فان

$$\exp\left(\frac{E_c - E_F}{K_BT}\right) >> 1 \quad ...(7-19)$$

وبالتعويض عن هذه الحالة في المعادلة (14 - 7) نجد ان

$$n_c = n \exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_BT}\right) \quad ...(7-20)$$

او بعد التعويض عن E_F في المعادلة (15 - 7) نحصل على

$$n_c = n \exp\left(\frac{E_V - E_c}{2K_BT}\right) = ne^{-E_g/2K_BT} \quad ...(7-21)$$

حيث $E_V - E_c = E_g$

تشير المعادلة (21 - 7) الى ان عدد الالـكترونات في حزمة التوصيل يتناسب مع $e^{-E_g/2K_BT}$ وعليه فان تركيز الحاملات سوف يزداد بازدياد درجة حرارة المادة . من جهة اخرى نجد ان هذا العدد يتناقص مع ازدياد طاقة الفجوة E_g عند الدرجة الحرارية T . وهذا مايوضح سبب وجود عدد من الالـكترونات في حزمة التوصيل للعوازل اقل ماهو موجود في نفس الحزمة لاشباه الموصلات

بعد ان اخذ نا فكرة تقريبية عن موقع مستوى – فيرمي وكذلك عن العوامل التي يعتمد عليها تركيز الحاملات في الحزم ، سنحاول الان ان نحسب عدد الالكترونات والفجوات بطريقة اكثر دقة .

b- النموذج الحقيقي : –

يمكن حساب عدد الالـكترونات المتواجدة في مدى الطاقة $E + dE , E$ من المعادلة

$$dn = D(E) f(E) dE \qquad \dots (7-22)$$

حيث تمثل $D(E)dE$ كثافة الحالات في مدى الطاقة $E + dE , E$ واما $f(E)$ فتمثل احتمالية الاحتلال لمستوى الطاقة E . وحيث ان الحالات في حزمة التوصيل لاتمتلك الطاقة نفسها وانما تاخذ القيمة E_c عند قاعدة هذه الحزمة وتزداد هذه الطاقة صعودا عند الاتجاه الى قمة هذه الحزمة انظر الشكل (8 – 7) ، لذا فانه يجب عند حساب عدد الالـكترونات في حزمة التوصيل ، ان نكامل المعادلة (22 – 7) وان حدود التكامل هي من E_c الى قيمة الطاقة المكافئة لطاقة الحالة التي تقع عند قمة الحزمة . ذلك هوان

$$n = \int_{E_c}^{top} D(E) f(E) dE \qquad \dots (7-23)$$

وعند التعويض عن قيمة $D(E)$ من المعادلة (22 – 5) نجد ان كثافة الحالات للالـكترون الحر هي

$$D(E)dE = 2 \times \frac{4\pi}{h^3} m^{3/2} (2E)^{1/2} dE \qquad \dots (7-24)$$

ومع كون الالـكترون في حزمة التوصيل ليس حرا الا انه يمكن ان يعامل كالـكترون حر عندما تستبدل كتلته بالـكتلة الفعلية $m^* = \hbar^2 / (d^2E / dk^2)$. عليه فان كثافة الحالات للالـكترونات في حزمة التوصيل هي

$$D(E)dE = 2 \left(\frac{4\pi}{h^3} \right) (2E)^{1/2} m_e^{*3/2} dE \qquad (7-25)$$

الان اذا اعتبرنا ان الطاقة الدنيا للالـكترون هي E_c فان كثافة الحالات سوف تكون

$$D(E)\,dE = 2\left(\frac{4\pi}{h^3}\right)2^{1/2}(m_e^*)^{3/2}(E - E_c)^{1/2}\,dE \quad \ldots (7-26)$$

وبهذا فان

$$dn = \frac{4\pi}{h^3}(2m_e^*)^{3/2}\frac{(E - E_c)^{1/2}\,dE}{[\exp((E - E_F)/K_BT) + 1]} \quad \ldots (7-27)$$

وعند التكامل نحصل على

$$n_c = \frac{4\pi}{h^3}(2m_e^*)^{3/2}\int_{E_C}^{\infty}\frac{(E - E_c)^{1/2}\,dE}{[\exp((E - E_F/K_BT) + 1]} \quad \ldots (7-28)$$

يلاحظ ان الحد الاعلى للتكامل في المعادلة (7 - 28) قد استبدل بـ ∞ في المعادلة اعلاه وذلك لغرض السهولة في الحل .

وبما ان الحد الادنى لـ $E - E_F$ في المعادلة (7 - 28) هو $E_c - E_F$ وكذلك $E - E_F \geq K_BT$ والذي يعني ان $(E - E_F/K_BT) >> 1$ ، لذا فان

$$n_c = \frac{4\pi}{h^3}(2m_e^*)^{3/1}\int_{E_c}^{\infty}(E - E_c)^{1/2}\exp\left(\frac{E_F - E}{K_BT}\right)dE \quad \ldots (7-29)$$

لحل التكامل اعلاه ضع $E=E_C+x$

وعند التعويض نجد أن

$$n_c = \frac{4\pi}{h^3}(2m_e^*)^{3/2}\exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_BT}\right)\int_0^{\infty}x^{1/2}e^{-x/KT}dx \quad \ldots (7-30)$$

وحيث ان

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-X/K_BT} dx = (K_BT)^{3/2} \frac{\pi}{2}^{1/2} \quad \dots (7-31)$$

عليه فان

$$n_c = 2\left(\frac{2\pi m_e^* K_BT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_BT}\right) \quad \dots (7-32)$$

وباتباع الطريقة اعلاه يمكن حساب عدد الفجوات في حزمة التكافؤ ولكن مع الاخذ ينظر الاعتبار النقاط التاليـة :

a- ان احتمالية عدم احتلال مستوى الطاقة E_c حزمة التكافؤ هي $(1 - f(E))$ وبهذا فان $dp = D(E)(1 - f(E)dE$

b- كون $E - E_F >> E_F$ يعني ان $\exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right) << 1$

c- حدود التكامل هي من $-\infty$ الى E_v وبهذا سنجد ان عدد الفجوات P في حزمة التكافؤ هي :

$$P = 2\left(\frac{2\pi m_h^* K_BT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - E_F}{K_BT}\right) \quad \dots (7-33)$$

وحيث ان عدد الفجوات في أشباه الموصلات الذاتية تساوي عدد الالكترونات $n_c = p = n$

لذا فان

$$2\left(\frac{2\pi m_e^* K_BT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_BT}\right) = 2\left(\frac{2\pi m_h^* K_BT}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_BT}\right) \quad \dots (7-34)$$

وبعد التبسيط نجد ان

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} K_BT \ln\left(\frac{m_h^*}{m_e^*}\right) \quad \dots (7-35)$$

من المعادلة (35 - 7) يمكن استنتاج ما يلي :

1 - اذا كانت $m_h^* = m_e^*$ فان $\ln 1$ يساوي صفر وبهذا فاننا نحصل على

$$E_F = \frac{E_V + E_c}{2}$$

وهي النتيجة نفسها التي حصلنا عليها باستخدام النموذج المبسط . ان هذا يعني أن النموذج المبسط يمتلك قدراً كبيراً من الصحة بالرغم من افتراضنا طاقة واحده لكل الالكترونات في حزمة التوصيل

2 - اذا كانت $m_h^* \neq m_e^*$ فان هذا يعني أن طاقة فيرمي هي دالة لدرجة الحرارة . على العموم تكون $m_h^* > m_e^*$ وبهذا فان مستوى فيرمي يرتفع عن موقعة قليلاً بارتفاع درجة الحرارة (في المنتصف من فجوة الطاقة). من المعادلتين (32 - 7) , (35 - 7) نجد أن

$$n = 2 \left(\frac{2\pi K_B T}{h^2} \right) (m_e^* m_h^*)^{3/4} \exp \left(\frac{E_V - E_c}{K_B T} \right) \quad \dots (7-36)$$

وعند وضع $n_i = n = p$ حيث n_i يدعى تركيز الحاملات الذاتية ، نجد ان

$$n_i = 2 \left(\frac{2\pi K_B T}{h^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g / 2K_B T} \quad \dots (7-37)$$

حيث تمثل E_g طاقة الفجوة

وعند التعويض عن n_i من المعادلة اعلاه في المعادلة (10 - 7) نجد أن التوصلية الكهربائية σ_i تساوي

$$\sigma_i = 2e \left(\frac{2\pi K_B T}{h^2} \right)^{3/2} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g / K_B T} (\mu_e + \mu_h) \quad \dots (7-38)$$

المعادلة (38 - 7) تشير الى ان التوصيلية الكهربائية لاشباه الموصلات الذاتية عند درجة حرارية معينة تعتمد بصورة اسية سالبة على طاقة الفجوة E_g وكذلك على تحركية كل من الالكترونات والفجوات . ان مقدار التحركية في اشباه الموصلات النقية يحدد بواسطة

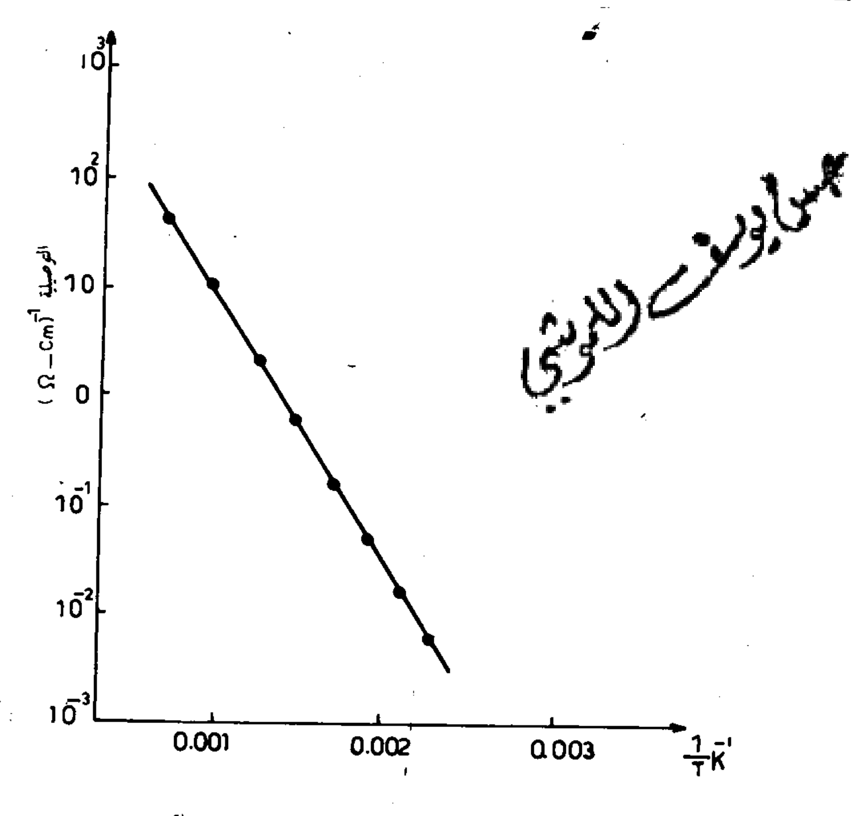
التفاعل بين الالكترونات وموجات الشبيكة أو الفونونات ويعتمد بصورة عامة على $T^{-3/2}$ عليه فانه يصبح بالامكان كتابة المعادلة (38 – 7) بالصورة التالية :

$$\sigma_i = A\, e^{-E_g / 2K_B T} \qquad \dots (7-39)$$

حيث A هو ثابت . عند أخذ اللوغاريتم لكلا طرفي المعادلة (39 – 7) نحصل على

$$\ln \sigma_i = \ln A - E_g / 2K_B T \qquad \dots (7-40)$$

المعادلة (40 – 7) تعطينا الطريقة لحساب طاقة الفجوة في المواد النقية . ان قياس التوصلية الذاتية في المواد عند مختلف درجات الحرارة ساعدنا على رسم النتائج على ورقة نصف لوغارتمية . ان انحدار الخط الناتج سوف يكون $E_g / 2K_B$ ، وعلية يمكن حساب طاقة الفجوة – الشكل (10 – 7) .



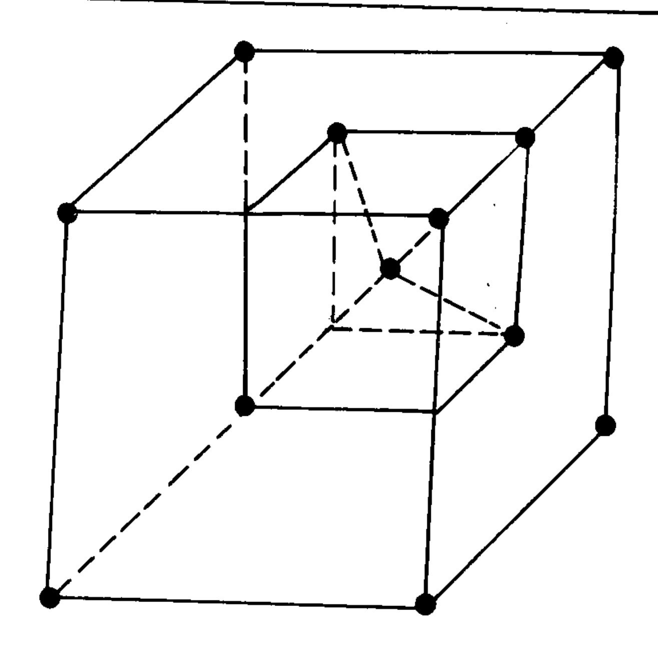
الشكل (10 – 7) تغيير التوصلية مع درجة الحرارة (لمادة شبه موصلة)

5 - 7 اشباه الموصلات المطعمة :

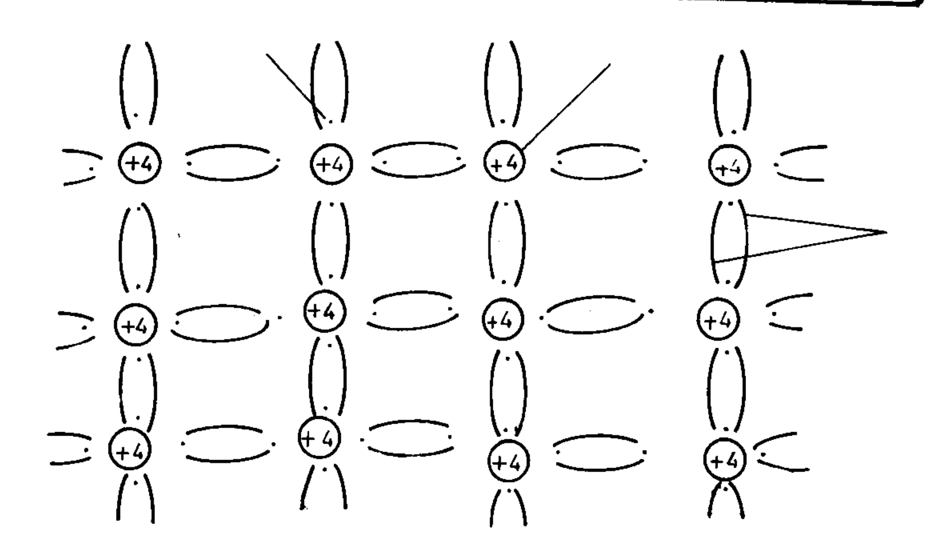
تحتوي اشباه الموصلات الذاتية على اعداد متساوية من الالكترونات والفجوات كذلك فان عدد هذه الحاملات يكون قليلاً جداً عند درجات الحرارة الاعتيادية الامر الذي يعني ان التوصلية الكهربائية لهذه المواد تكون ضعيفة جداً عند مثل هذه الدرجات الحرارية مما يلزم تسليط مجال كهربائي قوي جداً على هذه المواد للحصول على تيار محسوس . في معظم التطبيقات العملية ، نحتاج الى مواد شبه موصلة تحتوي على نوع واحد من الحاملات للتيار . ان الحصول على مثل هذه النماذج يتم عادة بواسطة حقن المادة شبه الموصلة بالشوائب المناسبة وتسمى هذه العملية بالتطعيم (dopping)

أن تأثر الخواص الكهربائية لاشباه الموصلات باضافة بعض الشوائب ، يكون كبيرا فمثلاً اضافة البورون الى السيلكون بنسبة 1 ذرة بورون 10^5 ذرة سيليكون سيرفع التوصلية الكهربائية للسيلكون النقي بعامل يبلغ 10^3 اضعاف عند درجة حرارة الغرفة أن السبب وراء هذه الزيادة في التوصلية الكهربائية يعود الي الزيادة في تركيز حاملات التيار فيما يلي سنبحث على وجه الخصوص تأثير الشوائب في السليكون والجرمانيوم :-

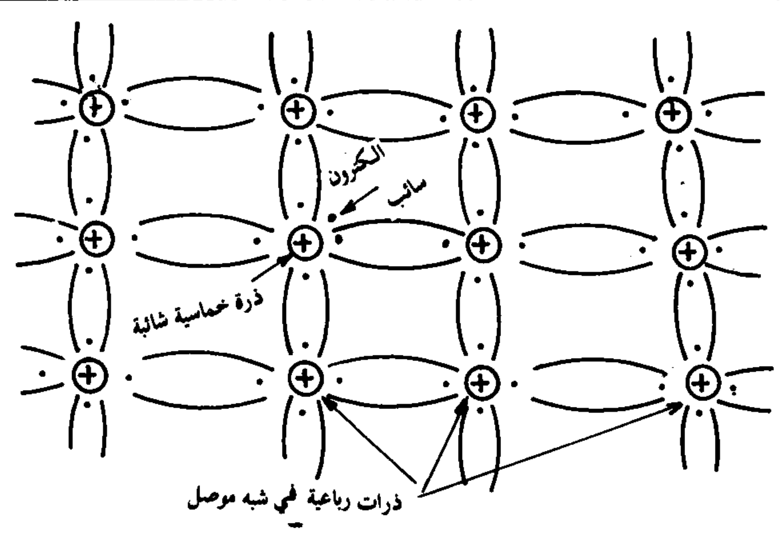
يتبلور هذان العنصران بصورة تركيب الماس الشكل (11 - 7) . حيث تكون لكل ذرة اربعة الكترونات تكافؤ . وترتبط مع الذرات الاربعة المجاورة باربعة اواصر تحتوي كل منها على الكترونين تدعى بالاواصر التساهمية . الشكل (12 - 7) يوضح الاواصر التساهمية في الجرمانيوم النقي . واذا استعضنا عن ذرة عادية من ذرات الشبيكة بذرة شائبة خماسية التكافؤ . كالفسفور . الزرنيخ . أو الانتيموت . فسوف يتبقى الكترون تكافؤ من الذرة الشائبة الخماسية بعد تكوين الاواصر التساهمية الاربعة مع أقرب الجارات . أي بعد ابواء الذرة الشائبة في التركيب بأقل مايمكن من التشوية . والمحقق من دراسة ثابت الشبيكة ومن تعيين كثافة الناقلات أن الشوائب الخماسية التكافؤ تدخل الشبيكة بالتعويض مكان الذرات المعتادة لا باللجوء الى الى المواضع الواقعة بين الذرات ويوضح الشكل (13 - 7) أن التركيب الجديد قد اصبح يحتوي على شحنة موجبة زائدة نتجت من ذرة الشائب التي فقدت الكترون . كما اصبح لدينا ايضاً هذا الالكترون الزائد . أن ذرات الشوائب التي تتأين لتعطي الكترون تسمى ما نحات (Donors) وكذلك فان اشباه الموصلات التي تحتوي على هذا النوع من الذرات الشائبة تدعى بالمواد من النوع - n . ان الالكترون الزائد في الذرة الشائبة الخماسية يكون مرتبطاً الى نواة هذه الذرة عند درجات الحرارة الواطئة . ويمكن بسهولة



الشكل(11 - 7)تركيب الماس



الشكل(12 - 7)الاواصر التساهمية في الجرمانيوم النقي



الشكل(13- 7)مادة شبه موصلة من نوع - n

حساب طاقة الربط لذرة مانحة باستخدام نظرية بور لذرة الهيدرجين ولكن مع مراعاة تأثير ثابت العازل للوسط وكذلك مراعاة الكتلة الفعلية للالكترون في الجهد الدوري للبلورة . ان السبب الكامن وراء التعديل هو ان الالكترون الزائد سوف يتحرك في مجال الجهد الكهروستاتيكي ($e / \in$) لايون الشائب. حيث تمثل $\in$ ثابت العازل للوسط وتساوي $\in = \in_0 \in_r$ بدلا من $e / \in_0$. وان ادخال العامل $\frac{1}{\in_r}$ في الحساب هو ضروري وذلك للتعبير عن الانخفاض في القوة الكهروستاتيكية والناشيء بسبب من الاستقطاب الالكتروني للوسط، أن هذا الحساب صحيح للمدرات الكبيرة بالقياس الى المسافة بين الذرات ، وللسرع الالكترونية البطئية الى يكون فيها الزمن اللازم للمرور بذرة طويلاً بالقياس الى زمن الدورة للالكترونات الداخلية المربوطة بالذرة . وتتحقق هذه الشروط في الالكترون الزائد في ذرات الفسفور والزرنيخ الموجودة كشوائب داخل الجرمانيوم أوالسيليكون والخلاصة اننا لانحتاج الا الى وضع $e^2 / \in$ بدلا من $e / \in_0$ ووضع m^* بدلا من m في النتائج المعروفة لنظرية بور طبقاً لهذه النظرية نجد ان معادلة الحركة لالكترون يدور في مدار دائرى حول النواه هي :

$$\frac{m^* v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi \in_0 \in_r r^2} \qquad \dots (7-41)$$

حيث ϵ_r ثابت العازل النسبي للمادة، الشبه الموصلة . كذلك فانه لدينا من نظرية بور ان الزخم الزاوي هو مكمم . اي ان

$$m^*vr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \qquad \ldots (7-42)$$

وحيث ان الطاقة الـكلية للالـكترون هي

$$E = K.E + P.E \qquad \ldots (7-43)$$

الطاقة الـكلية = الطاقة الحركية + الطاقة الـكامنة

$$P.E = \int_{\infty}^{r} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r^2}\, dr = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \qquad \ldots (7-44)$$

$$K.E = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \qquad \ldots (7-45)$$

$$\therefore E = -\frac{m^*e^4}{8\epsilon_0^2\epsilon_r^2 n^2h^2} \qquad \ldots (7-46)$$

يدخل ثابت العازل في معادلة الطاقة اعلاه كـكمية مربعة في حين ان الـكتلـــة الفعلية تدخل فقط بالاس الاول وهي نتائج بور نفسها مع كتابة m^* بدلا من m و $\frac{e^2}{\epsilon}$ بدلا من e^2 . ويمكننا الحصول على فكرة عامة عن مناسيب الشوائب باستعمال قيمة متوسطة للـكتل الفعلية ، سناخذ $m^* = 0{\cdot}12m$ للالـكترونات فـــي الجرمانيوم و $m^* = 0{\cdot}25m$ للالـكترونات في السيليكون . كذلك سناخذ قيمة ثابت العازل $15{\cdot}8$ للجرمانيوم و $11{\cdot}7$ للسيليكون وتطبق هذه القيم بدقة عالية ابتداءاً من الترددات المنخفضة الى الترددات العالية المناظرة لفجوة الطاقة .

ان جهد التاين لذرة الهيدروجين الحر هو $13{\cdot}6$ الـكترون فولت . وهو مايناظر استخدام المعادلة $(7-46)$ مع وضع $n = 1, m^* = m, \epsilon_r = 1$ اما فـــي الجرمانيوم فجهد التاين بموجب النموذج الراهن ينبغي نقصه بالنسبة للهيدروجين بالعامل $\frac{m^*}{m\epsilon^2} = \frac{0{\cdot}12}{250} = 4{\cdot}8 \times 10^{-4}$ وبهذا يعطي $13{\cdot}6 \times 4{\cdot}8 \times 10^{-4} = 0{\cdot}0065$

الـكترون فولت في حين ان النتيجة المناظرة في السيلـكون هي 0.025 . لذا فان الطاقة الحرارية اللازمة لتاين الالـكترونات من ذرات الشوائب الخامسية التكافؤ هي اقل بكثير من طاقة الفجوة الممنوعة في اشباه الموصلات . عليه فانه حتى عند الدرجات الحرارية الواطئة فانه يتوقع ان معظم الذرات الشائبة سوف تساهم بالالكترونات الى حزمة التوصيل ، لذا فان التوصلية الـكهربائية في المواد من النوع n - تكون اكبر بكثير من تلك في المواد النقية .

وكما يجوز ان يرتبط الالـكترون بشائب خماسي التكافؤ ، فكذلك تجوز ان ترتبط الفجوة بشائب ثلاثي التكافؤ في الجرمانيوم او السيليكون . والمقارنة بين الوضعين مبينة في الشكل (14 – 7) والشوائب النموذجية الثلاثية التكافؤ هي البورون ، الالمنيوم ، الجاليوم والانديوم ، وتسمى هذه الشوائب بالمتقبلات (acceptors) ، لانها تتقبل الـكترونا من حزمة التكافؤ فتخلف فيه فجوات . ووجود الفجوات شبيهة من حيث المبدأ بوجود الالـكترونات وان طاقات التاين للمتقبلات لاتختلف في كثير عن مثيلاتها في المانحات . ومن حيث المبدأ يمكن استخدام نموذج بور للفجوات تماماً كما في حالة الالـكترونات ، مع استثناء واحد هو انه في حالة الجرمانيوم والسيلـكون يوجد انطباق مداري نتيجة لوجود ثلاثة شرائط تكافؤ منطبقة في مركز نطاق بريليون($k = 0$) وتظهر فيه ثلاث كتل فعلية للفجوات عند قيمة شريط التكافؤ ، الامر الذي يعقد الحساب النظري كثيراً .

ان طاقات التأين للمانحات والمتقبلات يمكن مقارنتها بالطاقة الحرارية $K_B T$ عند درجة حرارة الغرفة (0.026 الـكترون فولت) ، لذا فمن المتوقع ان نجد للتأين الحراري لذرات الشوائب المانحة والمتقبلة اهمية خاصة في التوصيل الـكهربائي للجرمانيوم والسيلـكون عند درجة حرارة الغرفة . فاذا كانت الذرات المانحة موجودة باعداد اكبر بكثير من اعداد المتقبلات ، فان التأين الحراري للمانحات ينشأ عنه انطلاق الالـكترونات الى شريط التوصيل وتكون التوصلية الـكهربائية للعينة محكومة بالالـكترونات (شحنات سالبة) فتكون المادة وكما راينا ، من نوع n - ، اما اذا كانت الغلبة للمتقبلات فان التوصلية الـكهربائية ستكون محكومة بالفجوات (شحنات موجبة المتخلفة في حزمة التكافؤ) وتكون المادة من نوع p - . في حالة غياب الشوائب ، فان الالـكترونات والفجوات سوف تتواجد باعداد متساوية وتوصف المادة عندئذ بالموصل الذاتي . التركيز الذاتي للالـكترونات عند درجة 300 كيلفن هو 2.5×10^{13}

الشكل (14- 7) شبه موصل من نوع - p ونوع - n

لـكل سم^3 في الجرمانيوم و 1.4×10^{10} لـكل سم^3 في السيليكون اما المقاومـــة الـكهربائية النوعية الذاتية فهي 43 اوم – سم للجرمانيوم 2.6×10^5 اوم – سم للسيليكون . وبما ان اقل تركيز للشوائب امكن الحصول عليه الى الآن يبلغ مرتبة 10^{12} ذرة شوائب في السنتميتر المكعب ، فمن الجلي انه يمكننا استخدام الجرمانيوم الذاتي في درجة حرارة الغرفة اما السيليكون فلايمكن اعتباره ذاتيا في درجة حرارة الغرفة .

6 – 7 تركيز الحاملات في اشباه الموصلات المطعمة :

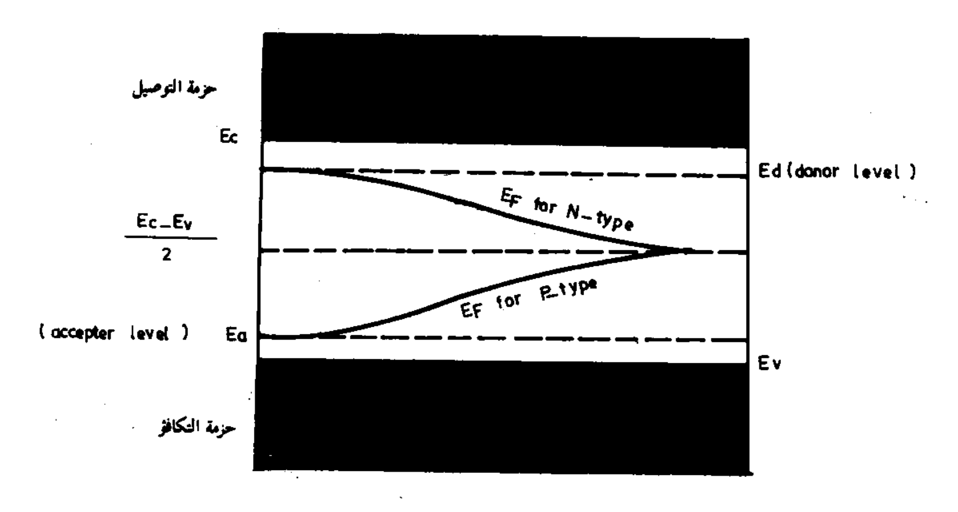
سنحاول الان ان ندرس احصائية هامة وهي تعيين التركيز للمانحات والمتقبلات المؤينة في حالة التوازن الحراري عند الدرجة T . دعنا الان ، نفرض ان لدينا شبـه موصل يحتوي على كلا النوعين من الذرات، المانحة والمتقبلة . عند درجة حرارة الصفر المطلق . تكون حزمة التوصيل في هذه المادة المطعمة ، كما هي الحال في المواد الذاتية ، مملوءة تماما بينما تكون حزمة التكافؤ فارغة تماما . بالاضافة الى هذا نجد ان مخطط مستويات الطاقة ، الشكل (7 – 15) ، لاشباه الموصلات الشائبة يحتوي خلافا لما هو عليه في المواد الذاتية – على مستويات الطاقة التي تمثل الحالات الـكمية لالـكترونات الذرات المانحة والمتقبلة . يلاحظ من الشكل ان مواقع هذه المستويات تكون قريبة من الحزمتين (التوصيل والتكافؤ) . ان السبب في ذلك هو ان مقدار الطاقة اللازمة ، كما راينا في البند السابق ، لتحرير الالـكترونات من الذرات المانحة ، مثلا ، ونقلها الى حزمة التوصيل يكون صغيراً جداً بالمقارنة مع طاقة الفجوة .

عند ارتفاع درجة حرارة شبه الموصل فان الالـكترونات في البداية ، تثار حراريا من مستويات الذرات المانحة الى حزمة التوصيل وكذلك من حزمة التكافؤ الى مستويات الذرات المتقبلة . الالـكترونات التي غادرت تواً المستويات المانحة سوف تترك وراءها ذرات مانحة موجبة الشحنة اما الالـكترونات التي تغادر حزمة التكافؤ فانها سوف تجعل الذرات المتقبلة ايونات سالبة الشحنة وتترك وراءها فجوات في حزمة التكافؤ . اما عند ارتفاع درجة الحرارة اكثر من ذلك فان الالـكترونات سوف تغادر حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل مباشرة .

افترض ان n يمثل عدد الالـكترونات لوحدة الحجوم في حزمة التوصيل وكذلك p يمثل عدد الفجوات لوحدة الحجوم في حزمة التكافؤ . فاذا اخذنا n_A على

انه عدد المتقبلات المتأينة (سالبة الشحنة) لوحدة الحجوم و p_D عدد المانحات المتأينة (الموجبة الشحنة) لوحدة الحجوم فانه طبقا لتعادل الشحنات عند اي درجة حرارية T نجد ان

$$n + n_A = p + p_D \qquad \dots (7-47)$$



الشكل(15- 7)مخطط حزم الطاقة لشبه موصل مطّعم

واذا افترضنا الان ان N_A يمثل عدد الذرات المتقبلة لوحدة الحجوم وان N_D يمثل عدد الذرات المانحة لوحدة الحجوم . لذا فانه بالامكان كتابة

$$n_A = N_A f(E_A) \qquad \dots (7-48)$$

حيث تمثل $f(E_A)$ احتمالية الاحتلال للالكترون كماله الطاقة E_A. وبالتعويض عن قيمة $f(E_A)$ من المعادلة (7 – 13) . نحصل على

$$n_A = N_A \left\{ \exp\left(\frac{E_A - E_F}{K_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} \qquad \dots (7-49)$$

كذلك يمكن القول

$$P_D = N_D (1 - f (E_D)) \qquad \dots (7-50)$$

حيث تمثل $(1 - f(E_D))$ الاحتمالية ان الالكترون قد غادر حالة الطاقة E_D .
وباستخدام المعادلة (7 - 13) نجد ان

$$1 - f(E_F) = 1 - \left\{ \exp\left(\frac{E_D - E_F}{K_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} \qquad \ldots (7-51)$$

او ان

$$P_D = \frac{N_D}{\{ \exp(E_F - E_D / E_D T) + 1 \}} \qquad \ldots (7-52)$$

ان حساب عدد الالكترونات في حزمة التوصيل يتم بالطريقة التي تم بها حساب هذه الالكترونات للمواد الذاتية . ان عدد الالكترونات في مدى الطاقة $E + dE , E$ في حزمة التوصيل هو

$$dn = D(E)\, f(E)\, dE$$

$$D(E)\, dE = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$

في المعادلة اعلاه استبدلت $E^{1/2}$ بـ $(E - E_c)^{1/2}$ وذلك بسبب ان الطاقة الدنيا لالكترون حزمة التوصيل هي E_c .

وعند التعويض عن $f(E)$ نحصل على

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \left\{ \exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T} \right) + 1 \right]^{-1} dE$$

$$\ldots (7-53)$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \left\{ \exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} dE$$

$$\ldots (7-54)$$

سنفترض ان $E - E_F >> 2K_B T$ وباستخدام التقريب

$$\exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T} \right) + 1 \simeq \exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T} \right) \qquad \ldots (7-55)$$

نحصل على ان

$$n = 2\left(\frac{2\pi m_e^* K_B T}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_B T}\right) \quad \ldots (7-56)$$

ان حساب عدد الفجوات في حزمة التكافؤ يتم بالطريقة التي تم بها حسابه في المواد الذاتية . ان عدد الفجوات في مدى الطاقة $E + dE , E$ في حزمة هو

$$dp = D(E) \{ 1 - f(E) \} dE \quad \ldots (7-57)$$

حيث $(1 - f(E))$ تمثل وجود مكان او فجوة ذات طاقة E وان

$$D(E)\, dE = \frac{4\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} (E - E_v)^{1/2} dE$$

استبدلت هنا $(E - E_V)^{1/2}$ بـ $E^{1/2}$ وذلك بسبب من ان الطاقة القصوى للفجوة هي E_V . وعليه فان

$$dp = \frac{4\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} (E - E_v)^{1/2} \left\{ 1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{K_B T}\right) \right\}^{-1}$$

$$\ldots (7-58)$$

وعلى افتراض ان $E_F - E \geq 2K_B T$ لكل قيم الطاقة الواقعة في حدود التكامل من ∞ – الى E_V نجد ان

$$P = \int_{-\infty}^{E_v} \frac{4\pi}{h^3} (2m_h^*)^{3/2} (E - E_v)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_F - E}{K_B T}\right) dE$$

$$\ldots (7-59)$$

لذا فان

$$P = 2\left(\frac{2\pi m_h^* K_B T}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_v - E_F}{K_B T}\right)$$

وبالتعويض في المعادلة (47 - 7) عن قيم كل من الرموز التي تحتويها نجد ان

$$2\left(\frac{2\pi m_h^* K_B T}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_F - E_c}{K_B T}\right) + \frac{N_A}{\{\exp((E_A - E_F)/K_B T) + 1\}}$$

$$= \frac{N_D}{\{\exp((E_F - E_D)/KT + 1\}} + 2\left(\frac{2\pi m_h^* K_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

$$\exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right) \qquad \dots(7-60)$$

سنتناول الان الحالة الخاصة التي فيها $N_A = 0$ ، وهي حالة غياب المتقبلات . ومن السهولة ان نفرض كذلك ان عدد المانحات الموجودة من الكبر بحيث يكفي لاخماد تركيز الثقوب N_D الى قيمة اقل من القيمة الذاتية ويحدث الاخماد لان المعادلة :

$$np = n_i^2 \qquad \dots(7-61)$$

هي صحيحة لكل اشباه الموصلات ذلك لانها في جوهرها تعبير عن قانون الفعل الكتلي اي ان حاصل ضرب np يساوي قيمة ثابتة . حينئذ لو زادت n بعامل معين فان p تنقص بمقلوب ذلك العامل . ان اهمالنا لـ p هو مكافيء لقولنا ان :

$$P = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right) \rightarrow 0 \qquad \dots(7-62)$$

وان

$$\exp(E_V - E_F / K_B T) << \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) \qquad \dots(7-63)$$

لاحظ اننا ابدلنا $\left(\frac{2\pi m_h^* K_B T}{h^2}\right)$ بـ N_V للسهولة فقط
بناء على ما جاء اعلاه فان المعادلة (7 - 60) يمكن اعادة كتابتها كما يلي

$$N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) = \frac{N_D}{(\exp(E_F - E_D)/K_B T + 1)} \qquad \dots(7-64)$$

او ان

$$N_D = N_C \exp\left(\frac{2E_F - E_C - E_D}{K_B T} \right) + N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T} \right)$$

... (7 - 65)...

حيث استبدل $(2\pi m_e^* K_B T / h^2)$ بـ N_C في المعادلتين اعلاه . بعد الترتيب نجد ان

$$e^{E_F/K_B T} \left\{ N_C \exp\left[- \frac{(E_C + E_D)}{K_B T} \right] \right\} + e^{E_F/K_B T} (N_C e^{-E_C/K_B T}) - N_D = 0$$

... (7 - 66)

المعادلة اعلاه هي معادلة من الدرجة الثانية بالنسبة لـ $e^{E_F/K_B T}$ لذلك وبعد التبسيط ، نجد ان

$$e^{E_F/KT} = \frac{-1 \mp \{ 1 + (4N_D/N_C) \exp[(E_C - E_D)/K_B T] \}^{1/2}}{2e^{-E_D/KT}}$$

... (7 - 67)

سنحسب E_F في حالتين نهائيتين سنفترض اولاً ان

$$\frac{4N_D}{N_C} \exp\left(\frac{E_C - E_D}{K_B T} \right) << 1 \qquad ... (7 - 68)$$

وهو مايناظر تركيزاً صغيراً للذرات المانحات (N_D) أو قيمة مرتفعة لدرجة الحرارة (T) حينئذ فأن

$$e^{E_F/K_B T} = \frac{N_D}{N_C} e^{E_C/K_B T} \qquad ... (7 - 69)$$

أو أن

$$E_F \simeq E_C + K_B T \ln \frac{N_D}{N_C} \qquad ... (7 - 70)$$

ومن هذه المعادلة (7 - 70) والمعادله (7 - 56) نجد أن

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T} \right) = N_C e^{-E_C/K_B T} e^{E_F/K_B T} \qquad ... (7 - 71)$$

أو أن

$$n = N_C e^{-E_C/K_B T} \frac{N_D}{N_C} e^{E_C/K_B T} = N_D \qquad \ldots (7-72)$$

وهذا مايعني ان عدد الكترونات التوصيل يساوي تقريباً عدد المانحات تحت الظروف السابقة . سنفترض في حالة نهائية ثانية أن : –

$$\frac{4N_D}{N_C} \exp\left(\frac{E_C - E_D}{K_B T} \right) >> 1 \qquad \ldots (7-73)$$

وهو ما يناظر تركيزاً كبيراً للذرات المانحات أو درجة حرارة منخفضة . وعليه فأن

$$e^{E_F/K_B T} = \left(\frac{N_D}{N_C} \right)^{1/2} \frac{\exp\{(E_C - E_D)/2K_B T\}}{e^{-E_D/K_B T}} \qquad \ldots (7-74)$$

أو أن

$$e^{E_F/K_B T} = \left(\frac{N_D}{N_C} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{E_C + E_D}{2K_B T} \right) \qquad \ldots (7-75)$$

من المعادلة (75 – 7) والمعادلة (56 – 7) نجد أن

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T} \right) = N_C e^{-E_C/K_B T} \left(\frac{N_D}{N_C} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{E_C + E_D}{2K_B T} \right) \qquad \ldots (7-76)$$

أو أن

$$n = (N_D N_C)^{1/2} \exp\left(\frac{E_D - E_C}{2K_B T} \right) \qquad \ldots (7-77)$$

$E_D - E_C$ هي طاقة التأين للمانحات – في هذه الحالة النهائية يتناسب تركيز الالكترونات مع الجذر التربيعي لتركيز المانحات . غير انه عند درجات الحرارة المنخفضة يوجد عادة عدد من الكترونات التوصيل أقل مما يوجد من ذرات المتقبلات الموجودة كشوائب لاخلاص منها ، ويتأين عدد من ذرات المانحات لسد حاجة المتقبلات الأمر الذي يؤدي الى خفض مستوى فيرمي وتثبيته عند E_D لاعند الموقع الذي تحدده المعادلة (35 – 7).في هذه الحالة تتناسب n مع $e^{-E_C/K_B T}$ وليس مع $e^{-E_C/2K_B T}$.

وتنطبق النتائج نفسها عند حساب P مع عمل التعديلات الملائمة ، على ان نفرض N_D تساوي صفراً .

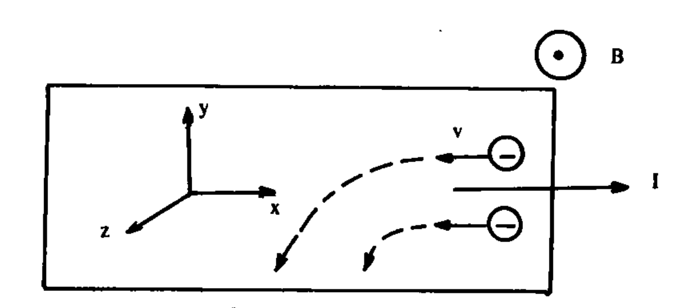
7 - 7 الرنين السايكلتروني وظاهرة هول في اشباه الموصلات :

ان تسليط مجال مغناطيسي على معدن او شبه موصل سوف يودي الى بروز عـدد من الظواهر ذات الاهمية العملية للتعرف على بعض خواص الكترونات التوصيل في هذه المواد . هذا وسنقتصر في دراستنا هنا على على ظاهرتين هما :

ظاهرة الرنين السايكلتروني (Cycltron resonance) و
ظاهرة هـول (Hall effect) .

1- الرنين السايكلتروني :

تشير معادلات ماكسويل (Maxwell) الى انه عند تسليط مجال مغناطيسي على الكترون ، فأن هذا المجال سوف يعمل على تغير اتجاه حركة الالكترون ولكن من غير ان يؤثر على طاقته . وعليه فان تسليط مجال مغناطيسي 3 بالاتجاه z لاحظ الشكل (16 - 7) . سوف يؤثر على حركة الالكترون في المستوى xy ولكن من غير ان يؤثر على حركته في الاتجاه z . وبهذا فان الالكترون اذا لم يعاني التشتت بواسطة الذرات ، فانه سوف يتحرك في المدار الخاص به في المستوى xy اضافة الى أي مسار يمكن ان يسلكه في الاتجاه z .



الشكل (16 - 7) - تغير اتجاه حركة الالكترون بعد تسليط المجال المغناطيسي

اما في حالة الالكترون الحر ذو الكتلة الفعلية m^* ، فان المدار الذي سوف يعمله هذا الالكترون سيكون دائرياً نصف قطره r ، اما التردد الزاوي للالكترون فهو ω_c هذه الكميات $m^*, \omega_c, r,$ ترتبط مع القوه المركزية الطاردة

$$F_{cent} = m^* \omega^2 r \qquad \dots (7-78)$$

اما قوة التعادل المتولدة بفعل تسليط المجال المغناطيسي والتي تقابل القوة اعلاه وتدعى بقوة لورنتز (Lorentz force) فأنها تساوي .

$$F_L = r\omega_c eB \qquad \dots (7-79)$$

وعند المساواه بين هاتين القوتين نحصل على :

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \qquad \dots (7-80)$$

أو أن

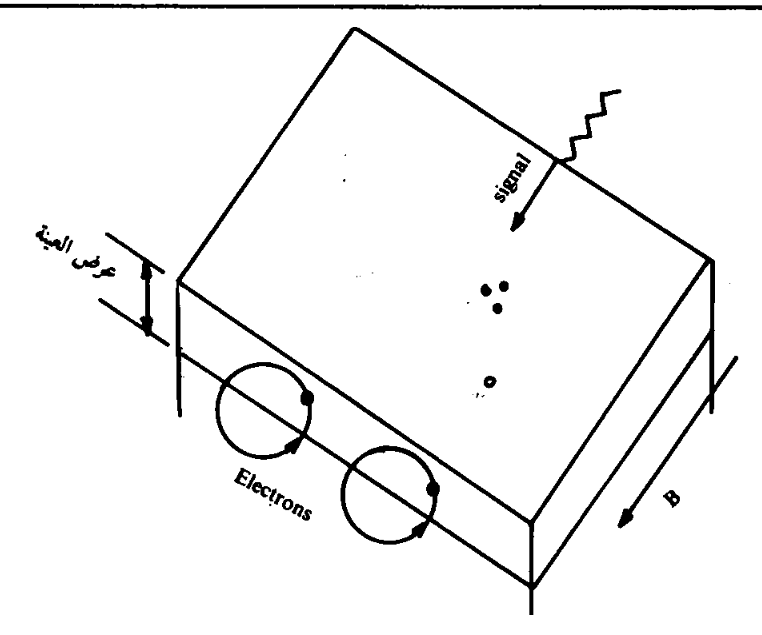
$$\nu_c = \frac{\omega_c}{2\pi} = 28.0\left(\frac{Bm}{m^*}\right) \text{GHZ} \qquad \dots (7-81)$$

حيث تكون وحدات B هنا هي تسلا (Tesla)

هذا التردد ν_c يدعى بالتردد السايكلتروني وذلك لأستخدام العلاقة اعلاه عند حساب تردد جسيم كتلته m . وشحنته e . مثلا ، والناتج عن تدوير هذا الجسيم في جهاز السايكلترون باستخدام مجال مغناطيسي شدته B .

على ضوء مما تقدم نستطيع القول انه اذا ما سلك الجسيم بشكل يدل على ان كتلته الفعلية m^* تختلف نوعا ما عن m . فان هذا سوف يظهر مباشرة كتغير في تردده السايكلتروني وبهذا فان تجارب التردد السايكلتروني تزودنا بالطريقة الوحيدة المباشرة لتعين الكتل الفعلية لحاملات الشحنة في المعادن واشباه الموصلات وكذلك القدرة على التميز بين الفجوات والالكترونات. ولتوضيح ذلك دعنا الان نفرض أن اشارة كهرومغناطيسية تمر خلال شريحة وفي اتجاه موازٍ لـ B . انظر الشكل (17 - 7) . المجال الكهربائي المرافق للاشارة سوف يؤثر على حركة الالكترونات وبهذا فان بعضامن الطاقة المرافقة لهذا المجال سوف يتم امتصاصها من قبل الالكترون . اما اعظم معدل للامتصاص فانه يحدث عندما يكون تردد الاشارة مساويا بالضبط للتردد السايكلتروني للالكترون أي عندما يكـــون .

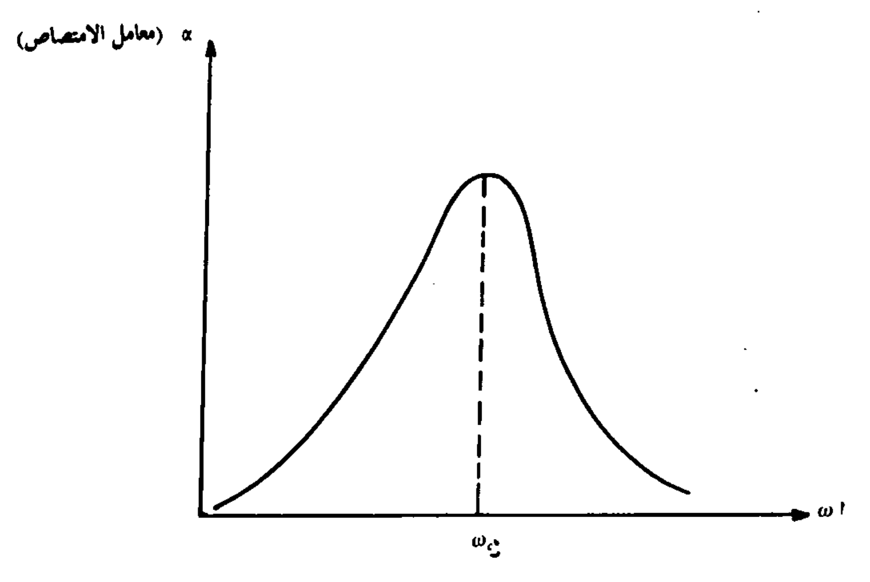
$$\omega = \omega_c \qquad \dots (7-82)$$



الشكل (7 - 17) عينة مستطيلة معرضة لمجال مغناطيسي واشارة كهرومغناطيسية

أن تحقق الشرط اعلاه يعني أن الالكترون سوف يكون قادرا على متابعة الاشارة في تحركها ومن غير حصول أي فرق في الطور وبهذا فان امتصاص الطاقة سوف يستمر خلال زمن الدورة كلها . اما عند عدم تحقق هذا الشرط فان الالكترون سوف يكون بالطور نفسه مع الموجة خلال جزء من الدورة فقط . يتم خلالها امتصاص الطاقة ، اما في الجزء المتبقي من الدورة ، فان الالكترون سوف يكون خارج الطور وبهذا فانه يعيد الطاقة الممتصة الى الموجة . ان شكل منحى الامتصاص كدالة للتردد يوضحة الشكل (7 - 18) .

دعنـا نفرض كذلك أن الموجة الساقطة هي موجة مستوية – الاستقطاب . « plane-polasized » في هذه الحالة يصبح بالإمكان التصور بان هذه الموجة وعند دخولها العينة تتحلل الى موجتين هما : – دائرتا الاستقطاب ، واحدة باتجاه عقـرب الساعة والاخرى بعكس الاتجاه ، وحيث ان الالكترون يدور عكس اتجاه عقرب الساعة لذا فان امتصاص الطاقة سوف يحدث من الموجات ذات نفـس الاتجاه فقط أي من غير ان يحدث أي امتصاص لطاقة الموجة الاخرى . وبهذا فان الموجة الخارجة من العينة سوف تكون مستقطبة جزئياً ، وفي اتجاه عقرب الساعه مما يدل شكل مؤكد ... قد حدث من قبل الالكترونات فقط



الشكل(18 - 7)امتصاص الالكترون للطاقة كدالة للتردد

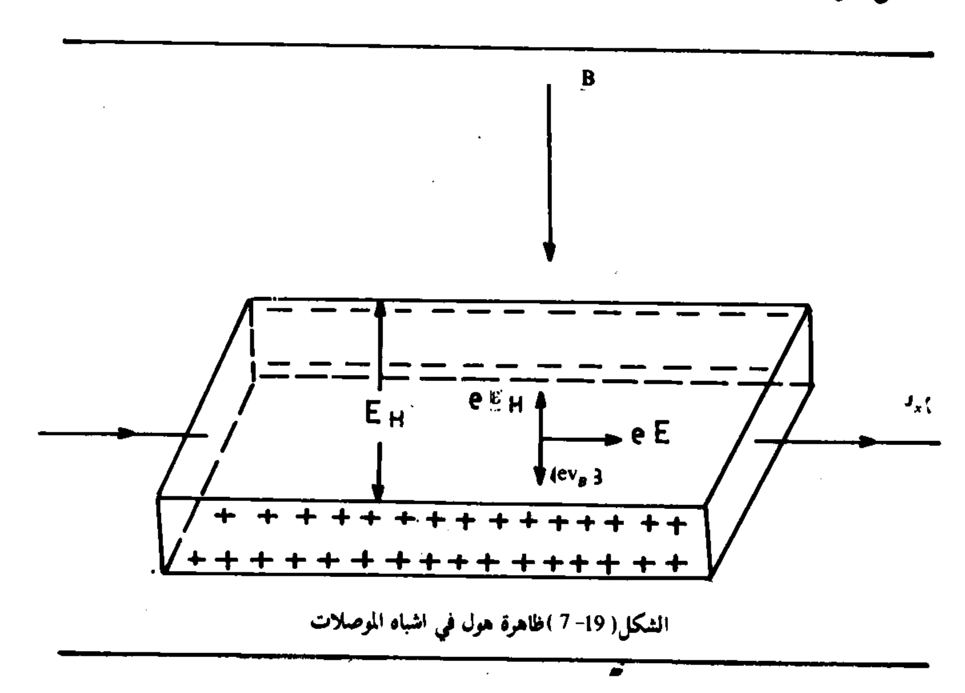
من جهة أخرى وفي حالة رنين الفجوات فان امتصاص الطاقة سوف يكون من الموجات الدائرة في اتجاه عقرب الساعة وبهذا فان الموجة الخارجة سوف تكون مستقطبة جزئياً وفي عكس اتجاه عقرب الساعة .

بقي أن نذكر أخيراً انه يفترض . لنجاح تجارب الرنين السايكلتروني . ان تكون العينه الواقعة تحت الدراسة عينية نقية الى حد كبير وكذلك يجب ان تجري هذه التجـارب عند درجات الحرارة الواطئة ($4K^{\circ}$) ذلك لانه عند هذه الدرجة تكون $\omega_c \tau > 1$ حيث يمثل τ زمن التصادم في هذه الحالة يمكن للالكترون ان يعمل عدة دورات قبل انتهاء زمن تصادمي واحـد .

2 ـ ظاهرة هول :

يزودنا اثر هول باوضح قرين عملي ادى الى ادخال فكرة ناقلات التيار الموجبة او الفجوات في البلورات . كذلك يعتبر اثر هول اداة قيمة . خاصة في بحوث اشباه الموصلات اذ انه يزودنا بوسيلة مباشرة لتقدير تركيز ناقلات الشحنة . ولفهم كيف يتم هذا دعنا ناخذ عينة مستطيلة من شبه موصل معرضة الى مجال كهربائي ε_x في الاتجاه x وكنتيجة لتسليط هذا المجال فان تياراً . يرمزله بـ J_x . سوف يسري بالاتجاه الموجب من

انظر الشكل (19 - 7) ، والذي يعني ان الكترونات التوصيل سوف تنساب بسرعة انسياق v بالاتجاه السالب من x . دعنا نفترض ايضا آن هناك n من هذه الالكترونات لها نفس سرعة الانسياق v .



الشكل(19- 7)ظاهرة هول في اشباه الموصلات

واذا ما سلطنا مجالاً مغناطيسياً عمودياً على اتجاه حركة هذه الالكترونات ، فان قوة لورنتز $(F = e(v \times B))$ ، المتولدة بفعل هذا المجال المغناطيسي والتي تتعرض لها الالكترونات ، سوف تحرف هذه الالكترونات عن مسارها الى الاسفل - انظر الشكل (19 - 7)الامر الذي يؤدي الى تراكم هذه الالكترونات على السطح الاسفل للعينة وظهور شحنة سالبة على هذا السطح . وحيث ان العينة هي متعادلة كهربائيا ، لذا فان ظهور الشحنة السالبة على السطح الاسفل منها سوف يؤدي بالمقابل الى ظهور شحنة موجبة على السطح العلوي للعينة وبسبب من قلة تركيز الالكترونات هناك . ان ظهور مثل هذه الشحنات المتعاكسة على سطحي العينة سوف يعمل على خلق مجال كهربائي متجه نحو الاسفل . هذا المجال يدعى بمجال هول (Hall field) .

دعنا الان نستخرج قيمة مجال هول .

ذكرنا آنفاً ان تعرض الالكترونات الى قوة لورنتز ، عند تسليط المجال المغناطيسي سوف يؤدي الى تراكم الشحنات . ان تراكم الشحنات هذا سوف يستمر الى ان تتساوى

قوة لورنتز مع القوة التي يولدها مجال هول والتي تدعى بقوة هول (Hall force)
وبهذا فانه في حالة التعادل نحصل على

$$F_L = F_H \qquad \dots (7-83)$$

وعند التعويض عن قيمة كل من هاتين القوتين نحصل على

$$+ e\varepsilon_H = + e v_x B \qquad \dots (7-84)$$

او ان

$$\varepsilon_H = v_x B \qquad \dots (7-85)$$

والذي هو مجال هول .

من المعتاد كتابة مجال هول بدلالة كميات مقاسة ، فاذا ما عوضنا عن $\bar{v}_x$ بدلالة كثافة التيار $J_x = n(-e)v_x$ فاننا نجد ان

$$\varepsilon_H = -\frac{1}{ne} J_x B \qquad \dots (7-86)$$

تشير المعادلة اعلاه ان مجال هول يتناسب طرديا مع كل من التيار والمجال المغناطيسي. ان ثابت التناسب ، اي $\varepsilon_H / J_x B$ ، والذي يعرف بثابت هول (Hall constant) عادة ما يرمز له بـ R_H . ذلك هو ان

$$R_H = -\frac{1}{ne} \qquad \dots (7-87)$$

النتيجة اعلاه تعد مهمة جدا من الناحية العملية . ذلك ان R_H تتناسب عكسيا مع تركيز الالكترونات n وبهذا فانه يصبح بالامكان حساب n من قياس مجال هول كذلك تشير المعادلة الى حقيقة مهمة اخرى هي ان اشارة ثابت هول تعتمد على اشارة الشحنة لحاملات التيار . وبهذا فان اشارة R_H تدل على اشارة حاملات التيار . الامر الذي يعتبر ذات اهمية كبيرة من الناحية العملية . وعلى وجه الخصوص عندما تكون حاملات التيار في العينة الواقعة تحت الدراسة هي من نوع موجب . فقد لوحظ في بعض المعادن كالحديد والخارصين والكوبالت وفي بعض المواد كأشباه الموصلات ان فولتية هول تكون معكوسة . اي ان الجهد عند الحافة السفلى للعينة يكون اعلى من الجهد عند الحافة العليا .

لتفسير هذه الظاهرة كان لابد من الافتراض ان ناقلات الشحنة تكون موجبة في هذه المواد وليست سالبة ، اي ان التياريشأ في هذه المواد نتيجة لحركة الشحنات الموجبة وهذا يعني ان سرعة انسياق هذه الشحنة (v_d) هي بنفس اتجاه التيار في هذه الحالة وعليه فان اتجاه القوة يكون كذلك ، حسب قاعدة اليد اليمنى ، نحو الاسفل . وهكذا فان الحافة السفلى تكون هذه المرة هي الموجبة بينما تكون الحافة العليا سالبة وهكذا تنعكس فولتية هول في هذه المواد وعند اتباع الطريقة نفسها اعلاه في ايجاد R_H سوف نحصل على

$$R_H = \frac{1}{pe} \qquad \dots (7-88)$$

حيث يمثل P تركيز الفجوات في هذه المواد

نوهنا في السابق ان التوصيلية الكهربائية في اشباه الموصلات تعتمد على مساهمة كلا النوعين من حاملات الشحنة (الالكترونات والفجوات) للتوصيل الكهربائي ، ومنها وجدنا ، المعادلة

$$\sigma = pe\mu_h + ne\mu_e$$

حيث تمثل μ_e , μ_h التحركية لكل من الفجوات والالكترونات وعلى التوالي . فاذا ما عرضنا نموذجاً مستطيلاً الى مجال كهربائي ε_x في الاتجاه x فان كلا من الفجوات والالكترونات سوف تكتسبان سرعة انسياق هما v_{dxe} , v_{dxh} وعلى التوالي واذا سلطنا مجالاً مغناطيسياً عمودياً على اتجاه حركة هذه الحاملات وكذلك اتجاه المجال الكهربائي فان قوة لورنتز ($F = evB$) المتولدة بفعل تسليط المجال المغناطيسي ، التي تتعرض لها كل من الفجوات والالكترونات سوف تحرف هذه الحاملات وباتجاهين متعاكسين ، عن مسارها الاصلي نحو جانبي العينة . ان ظهور الفجوات على سطح احد الجوانب للعينة والالكترونات على السطح الجانبي الاخر من العينة سوف يؤديان الى ظهور مجال هول في الاتجاه y . اما تيار الانحراف بسبب من حركة كل من الفجوات والالكترونات الجانبين فانه يساوي ($ep\,v_{yh} - en\,v_{ye}$) حيث ان v_{ye} , v_{yh} هما مركبتا السرعة للفجوات والالكترونات باتجاه y وعلى التوالي .
على اية حال ، في حالة التوازن لدينا

$$\sigma\varepsilon_y = ep\,v_{yh} - en\,v_{ye} \qquad \dots (7-89)$$

وبعد التعويض عن v_{ye}, v_{yh} بدلالة كل من v_{dxe}, v_{dxh} وكذلك v'_{dx}, μ_{dh} من خلال المعادلات التالية :

$$v_{dxe} = \frac{\tau_e e \varepsilon_x}{m} \quad \dots (7-90)$$

$$\hat{v}_{dxh} = \frac{\tau_h e \varepsilon_x}{m} \quad \dots (7-91)$$

حيث τ_h, τ_e هما زمنا التصادم لكل من الالكترونات والفجوات وعلى التوالي كذلك لدينا ان

$$e v_{dxh} B = \frac{m \hat{v}_{yh}}{\tau_h} \quad \dots (7-92)$$

$$e v_{dxe} B = \frac{m \hat{v}_{ye}}{\tau_e} \quad \dots (7-93)$$

نحصل على

$$\sigma\varepsilon_y = (ep\mu_h^2 - en\mu_e^2)\varepsilon_x B \quad \dots (7-94)$$

حيث

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m}, \quad \mu_h = \frac{e\tau_h}{m}$$

وحيث ان قانون اوم يشير الى ان

$$\varepsilon_x = \frac{J_x}{\sigma} \quad \dots (7-95)$$

لذا فان

$$\varepsilon_y = \frac{(p\mu_h^2 - n\mu_e^2)}{\sigma^2} J_x B \quad \dots (7-96)$$

وحيث ان ثابت هول هو $R_H = \frac{\varepsilon_y}{J_x}$ نحصل على

$$R_H = \frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{e(p\mu_h + n\mu_e)^2} \quad \dots (7-97)$$

في حالة اشباه الموصلات الذاتية حيث $n = p$ فان

$$R_H = \frac{\mu_h^2 - \mu_e^2}{en(\mu_h + \mu_e)^2} \quad \dots (7-98)$$

ان اشارة ثابت هول يعتمد هنا على القابلية التحركية النسبية للفجوات والالكترونات وفي حالة اشباه الموصلات الذاتية حيث ان $\mu_e > \mu_h$ يكون R_H سالبا .

الأسئلـــــة

7 - 1 تعتبر اشباه الموصلات النقية مواد عازلة عند درجات الحرارة الواطئة وموصلة عند الدرجات الحرارية العالية . اشرح ذلك بالتفصيل .

7 - 2 تزداد مقاومة اشباه الموصلات الشائبة مع ازدياد درجة الحرارة ولكنها تعود الى النقصان عند الاستمرار في رفع درجة الحرارة . وضح ذلك بالتفصيل

7 - 3 وضح الكيفية التي تساهم فيها الالكترونات الحرة في الحرارة النوعية للمواد

7 - 4 ماتأثير كون الجهد البلوري دوريا . على شكل وطبيعة مستويات الطاقة المسموح بها ؟ اشرح ذلك .

7 - 5 لماذا لاتشارك الالكترونات في الحزم الواطئة في عملية التوصيل الكهربائي ؟ وضح ذلك .

7 - 6 كيف تفسر على اساس نظرية الحزم ، انكسار الاواصر في البلورات

7 - 7 افرض ان A في المعادلة (دالة الموجة للالكترون) $\psi_{k(x)} = A(k,x)e^{-ikx}$ هي ثابت . برهن على ان مركبة الزخم باتجاه - x لهذا الالكترون في البلورة يعطى بواسطة $<P_x> = \hbar k_x$.

7 - 8 ماالمقصود باشباه الموصلات الذاتية ؟ اشرح بالتفصيل .

7 - 9 اشتق المعادلة (30 - 7) بدلالة المعادلة (12 - 7) .

7 - 10 وضح الفرق بين المعادلتين (30 - 7) , (46 - 7) .

7 - 11 احسب تركيز الفجوات والالكترونات في السليكون النقي عند درجة حرارة الغرفة اذا علمت ان $E_g = 1.1\ ev$, $m_h^* = m$, $m_e^* = 0.7m$. قارن بين هذا التركيز وعدد الحالات المتوفرة في حزمة التوصيل .

7 - 12 اذا كانت التوصيلة الذاتية للجرمانيوم والسليكون هما $e^{-6400/T}$, $e^{-4300/T}$ وعلى التوالي . احسب طاقة الفجوة لتلك المادتين عند درجة حرارة الغرفة اذا علمت ان الكتلة الفعلية للالكترون والفجوات مقدار ثابت .

7 - 13 ماالمقصود باشباه الموصلات الشائبة ؟ وضح ذلك بالتفصيل .

7 - 14 ما تأثير وجود الشائب على مستوى طاقة فيرمي ؟ وضح ذلك .

7 - 15 هل ان امتلاك شبه الموصل النقي للمقاومة يشير الى وجود الذرات القابلة ام المانحة ؟ كيف يمكنك معرفة وجود الذرات القابلة او المانحة في المادة ؟

7 - 16 قطعة من الجرمانيوم تحتوي على 10^{23} ذرة / م³ تصبح نقية عن 70 C: عند أي درجة حرارية تصبح قطعة من السيلكون نقية اذا احتوت على نفس التركيز من الشوائب .

7 - 17 عين قيمة طاقة فيرمي E_F عند درجة حرارة الغرفة في بلورة جرمانيوم تحتوي على 10^{22} ذرة مانحة م³ . افرض ان $E_a = 0.012, E_g = 0.72$ اليكترون فولت .

7 - 18 اكتب حاصل ضرب np . هل لهذه العلاقة من أهمية عملية في تحديد تركيز الحاملات في شبه الموصل ؟ اشرح ذلك .

7 - 19 عندما تكون $E - E_0 \geq 2K_BT$ برهن على ان $f(E) = e^{-(E-E_0)/K_BT}$

7 - 20 سيلكون مطعم بذرات مانحة بتركيز 10^{23} ذرة م³. ماهو تركيز الفجوات عند 300°K ؟ واين تقع E_F من E_V .

7 - 21 شبه موصل من السيلكون مطعّم بذرات واهبة ذات تركيز 10^{17} ذرة / سم³ ماهي المقاومية ؟ ماهو فرق جهد هول اذا كان سمك شبه الموصل 100µm والتيار المار $B_z = 1KG , I = 1mA$.

الفصل الثامن

العوازل

1 – 8 المقدمة

تشكل المتسعات احد اهم العناصر الكهربائية التي تستخدم بوفره في الدوائر الكهربائية وتكون على انواع عدة تبعا لنوع الوسط العازل بين صفيحتيها وكذلك تبعا لشكلها الهندسي. ولعل ابسط انواع هذه المتسعات جميعا هي المتسعة ذات الصفيحتين المتوازيتين والتي يمكن التعبير عن سعتها C (Capacitance) بالمعادلة :

$$C = \frac{\epsilon A}{d} \qquad \ldots (8-1)$$

حيث تمثل ε ثابت العازل dielectric caonstant او السماحية "permittivity" للوسط العازل بـ كولوم² نيوتن . م² و A مساحة الصفيحة بـ م² و d المسافة الفاصلة بين الصفيحتين بالمتر .

يتضح من المعادلة اعلاه . ان سعة المتسعة تعتمد على ابعاد الصفيحتين المتوازيتين وكذلك على المسافة الفاصلة بينهما وتتغير عند تغير اي من A او d اوكليهما معاً . كذلك تشير المعادلة اعلاه الى انه في حالة كون مساحة الصفيحتين وكذلك المسافة بينهما ثابتتين

فان سعة المتسعة تتغير تبعا لـ ϵ التي هي خاصية الوسط العازل . ذلك هو ان . $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$

وان ϵ_r تمثل ثابت العازل النسبي (relative dielectric constant) وتساوي واحدا للفراغ ، 12 للسليكون و80 للماء المقطر حيث ان السعة تتغير طردياً مع ϵ_r لذا فان اي تغير في ϵ_r بسبب من تغير في الحرارة او الضغط او تردد الفولتية المسلطة سوف يؤثر على عمل المتسعة كعنصر في الدائرة الكهربائية

ان الزيادة الحاصلة في سعة المتسعات التي يدخل الوسط العازل ضمن تركيبها تاتي من القدرة لهذه المواد العازلة على خزن الشحنات الكهربائية. ان دراسة مثل هذه المواد ينبع من الحاجة العملية والطلب المتزايد وبصورة مستمرة الى تصنيع متسعات ذات قوة تحمل كبيرة وسعة عالية وكذلك صغيرة الحجم اضافة الى استعمالاتها الكثيرة فـي الصناعات الكهربائية المختلفة منها مجالات الضغط العالي والاتصالات وثبات خواصها مع تغير درجات الحرارة في نقل وتحويل الطاقة الكهربائية .لذا فان الحاجة قائمة الى دراسة الكثير من هذه المواد العازلة لغرض فحصها وتصنيفها على اساس قوة تحملها وقيمة ثابت العازل التابع لها .

ان اي بحث عن مواد جديدة ومحسنة في هذا المجال يتطلب معرفة العوامل التي تسهم في تحديد خواصها . ان مهمة نظرية العوازل هي لتوفير مثل هذه المعرفة وذلك من خلال ربط التركيب الظاهري بالتركيب الذري والجزيئي لهذه المواد اي لايجاد العلاقات التي تربط بين الكميات التي يمكن قياسها عمليا وتلك التي لايمكن قياسها .

2 - 8 خصائص عامة للمواد

من المعروف ان الذرة تتكون من نواة تتكدس فيها البرتونات والنيوترنات فهي بذلك موجبة الشحنة محاطة بسحابة من الالكترونات السالبة ، والذرة الاعتيادية غير المشحونة تكون متعادلة كهربائيا نظرا لاحتوائها على عدد متساو من الالكترونات والبرتونات .

من نظرية بور (Bohr theory) للتركيب الذري يعرف ان الالكترونات تدور حول النواة في مدارات بيضوية متحدة المركز مع النواة . ان الذي يعنينا هنا هــو الـكترونات المدارات الخارجية والتي تسمى بالكترونات التكافؤ (electrons

(valance) ، ذلك لان هذه الالكترونات تدخل في التفاعلات الكيمياوية الاعتيادية وكذلك في توصيل التيار . ان الكترونات المدارات الداخلية تكون مرتبطة بقوة الى النواة ، وبهذا فانها لا تشارك الكترونات المدارات الخارجية في التوصيل الكهربائي لان الطاقة اللازمة للتغلب على القوة التي تربط هذه الالكترونات تكون في العادة كبيرة جدا .

وتكون المدارات الخارجية ، التابعة لذرات بعض المواد ، مملوءة تماما بالألكترونات: اي انها تحتوي على عدد كافي من الالكترونات يساوي $2n^2$ ، حيث يمثل n رقم المدار اما في معظم المواد فان هذه المدارات تكون ناقصة مما يجعل هذه الذرات تبدي ميلا لاكتساب اوفقدان الالكترونات . وبما ان الذرات التي تكون مدارات ذراتها الخارجية مملوءة تماما فانها لا تظهر مثل هذا الميل لكونها مستقرة كيمياويا ، لذا فانها غير قادرة على التوصيل الكهربائي وبهذا فانها تدعى بالعوازل او المـواد الدايلكترية (dielectrics) . ومن جهة اخرى هناك مواد ، تحتوي المدارات الخارجية لذراتها على الكترونين او الكترون واحد فقط وبهذا فان هذه الالكترونات تكون ضعيفة الارتباط بالنواة مما يسهل عملية قلعها وتحريرها للقيام بعملية التوصيل الكهربائي ، هذه المواد تدعى بالموصلات

بعد ان عرفنا ما هية الفرق بين المواد العازلة والموصلة من حيث القدره على التوصيل الكهربائي ، نجد انه من المناسب ان نسأل ! ماذا يحدث عند وضع مادة عازلة في مجال كهربائي منتظم كالمجال بين لوحي متسعة ذات اللوحين المتوازيين مثـلا ؟

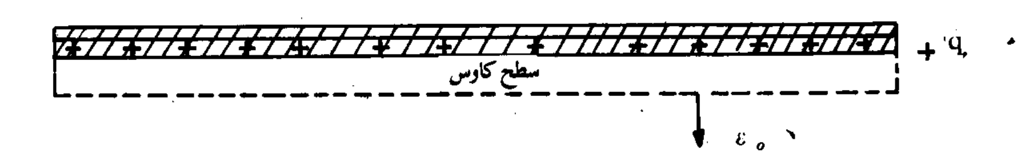
3 – 8 المتجهات الكهربائية الثلاث

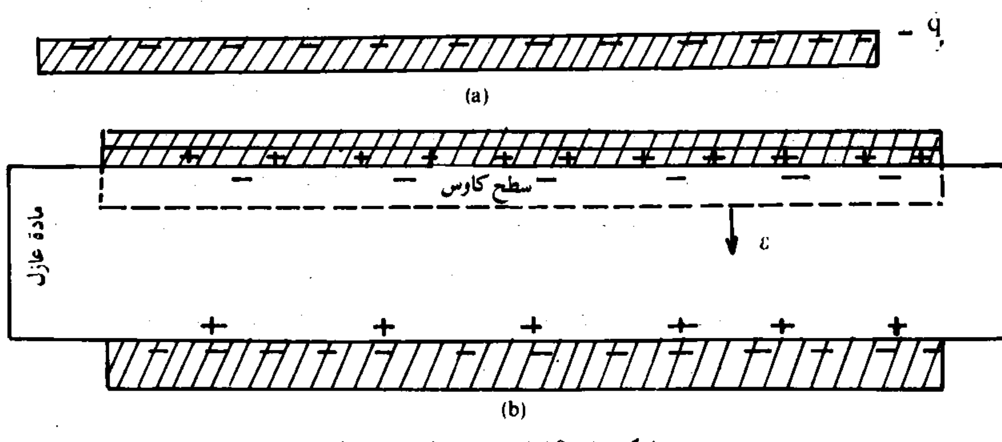
دعنا اولا ، وقبل ان نعرف ما هي المتجهات الثلاث – نوضح الكيفية التي يستخدام معها قانون كاوس (Gauss's law) في الحالات التي تتضمن وجود مادة عازلة وعند عدم وجود المادة العازلة بين لوحيها ، الشكل (1 – 8) . الصيغة الرياضية لقانون كاوس هي :-

$$\epsilon_0 \oint \underline{\varepsilon}\, d\underline{s} = q \qquad \ldots (8-2)$$

وحيث ان $\varepsilon = \varepsilon_0$ لذا فان قانون كاوس للحالة الاولى (الشكل (8 – 1a)) ، هو

$$\epsilon_0 \oint \underline{\varepsilon_0}\, ds = \epsilon_0\, \varepsilon_0\, A = q \qquad \ldots (8-3)$$





الشكل (1 - 8) المتسعة ذات الصفيحتين المتوازيتين
(a) – من غير وجود العازل
(b) – مع وجود العازل

او ان

$$\varepsilon_0 = q/\epsilon_0 A \qquad \dots (8-4)$$

اما في حالة وجود المادة العازلة (الشكل (8 - 1b)) . فان **قانون كاوس يصبح** :-

$$\epsilon_0 \oint \underset{\sim}{\varepsilon} \cdot d\underset{\sim}{s} = \epsilon_0 \varepsilon A = q - q_i \qquad \dots (8-5)$$

او ان

$$\underset{\sim}{\varepsilon} = \frac{1}{\epsilon_0 A}(q - q_i) \qquad \dots (8-6)$$

حيث تمثل q_i الشحنات السطحية المحتثة التي يجب تميزها هنا عن q التي تدعى بالشحنات الحرة على الصفيحتين . هذان النوعان من الشحنات يقع في سطح كاوس .

وبما انهما يختلفان في الاشارة لذا فان $q - q_i$ تمثل محصلة الشحنات داخل سطح كاوس .

وبتعويض القيمة $\left(\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{\epsilon_r} \right)$ في المعادلة (4 - 8) نحصل على :

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_0}{\epsilon_r} = q/\epsilon_r\epsilon_0 A \quad \ldots (8-7)$$

وعند التعويض عن قيمة ε هذه في المعادلة (6 - 8) ، نحصل على :

$$\frac{q}{\epsilon_r\epsilon_0 A} = \frac{q}{\epsilon_0 A} - \frac{q_i}{\epsilon_0 A} \quad \ldots (8-8)$$

وبعد التبسيط. نجد ان

$$q_i = q\left(1 - \frac{1}{\varepsilon_r}\right) \quad \ldots (8-9)$$

المعادلة (9 - 8) تشير بوضوح الى ان الشحنات السطحية المحتثة q_i هي دائما اقل من قيمة الشحنات الحرة وانها تساوي الصفر في حالة الفراغ (اي عندما يكون $\epsilon_r = 1$) .

دعنا الان نعيد كتابة المعادلة (8 - 8) بالصيغة التالية

$$\frac{q}{A} = \epsilon_0 \left(\frac{q}{\epsilon_r\epsilon_0 A} \right) + \frac{q_i}{A} \quad \ldots (8-10)$$

ان الحد الثاني في المعادلة 10 - 8 يمثل الشحنات السطحية المحتثة لوحدة المساحات وهذا ما يدعى بالاستقطاب الكهربائي . (P) اي .

$$P = q_i / A \quad \ldots (8-11)$$

كذلك فانه بالامكان تعريف الاستقطاب بطريقة مكا ، ذلك بضرب كل من البسط والمقام . في المعادلة اعلاه . بالمسافة بين اللوحين اي ان

$$P = q_i d / Ad \quad \ldots (8-12)$$

البسط يمثل حاصل ضرب الشحنات المحتثة في المسافة الفاصلة بينهما وبهذا فانه يكافيء عزم ثنائي قطب شحنتاه تساوي ε والمسافة الفاصلة بينهما d . اما المقام فانه يمثل حجم الوسط بين اللوحين . وبهذا فانه يصبح بالامكان تعريف الاستقطاب بانه العزم الثنائي القطب المحتث لوحدة الحجوم . وكما هو عليه الحال في ثنائي القطب فان اتجاه P

يكون من الشحنات المحتثة السالبة الى الشحنات المحتثة الموجبة . وعليه فان المعادلة (10 - 8) يمكن كتابتها بالصيغة التالية :

$$\frac{q}{A} = \epsilon_0 \varepsilon + P \qquad \dots (8-13)$$

حيث يعرف الحد $\frac{q}{A}$ بالازاحة الكهربائية (electric displacement) ويرمز لها عادة بـ D . لذا فان المعادلة (13 - 8) تصبح :

$$D = \epsilon_0 \varepsilon + P \qquad \dots (8-14)$$

وحيث ان كلا من ε , P هما متجهان لذا فان D هو الاخر سيكون بالضرورة كمية متجهة .

مما جاء اعلاه ومن التعاريف الواردة نستطيع القول :

1- ان الازاحة الكهربائية (D) ترتبط فقط مع الشحنات الحرة
2- ان الاستقطاب P مرتبط بالشحنات المقيدة (المستقطبة) فقط .
3- المجال الكهربائي داخل العازل ε يرتبط مع كلا الشحنات الحرة والمقيدة
4- بينما تكون وحدات ε بالنيوتن / الكلوم تكون وحدات كل من P أو D بالكولوم / م²

ولابد لنا من ان نذكر أخيرا انه بالامكان كتابة اي من P او D بدلالة ε فقط ذلك هو ان

$$D = \epsilon_r \epsilon_0 \varepsilon \qquad \dots (8-15)$$

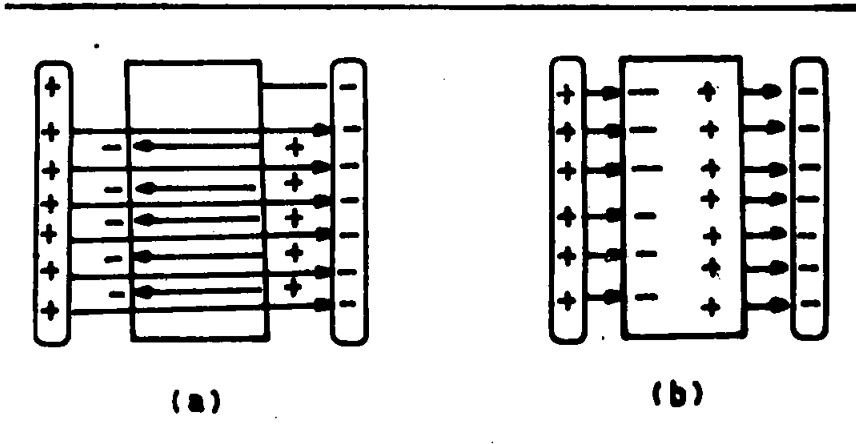
$$P = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \varepsilon \qquad \dots (8-16)$$

سنترك للطالب مهمة اشتقاق هاتين المعادلتين (15 - 8 و 16 - 8)

8 - 4 تأثير المجال الكهربائي المنتظم على المواد العازلة : -

عندما يوضع أي جسم غير مشحون ، موصلا كان ام عازلا ، في مجال كهربائي فان النتيجة هي دائما اعادة تنظيم الشحنات في هذا الجسم . فاذا كان الجسم موصلا فان الالكترونات الطليقة سوف تتحرك باتجاه معاكس للمجال بفعل القوى التي يولدها هذا المجال على هذه الالكترونات وتستمر حركة الالكترونات هذه الى ان تتجمع عند أحد طرفي الموصل تاركة بذلك فائضا من الشحنات الموجبة عند الطرف الآخر . بعدها

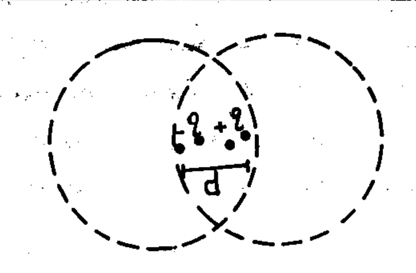
يصل الجسم الى حالة من الاتزان الكهروستاتيكي (electrostaic equitibrium) بحيث أن المجال الكهربائي الناشيء عن هذه الشحنات المحتثة المتجمعة على طرفي الموصل يساوي ويعاكس تماماً المجال الخارجي وبذلك تصبح محصلة المجال الكهربائي داخل الموصل صفراً . ففي الشكل (2 – 8) نلاحظ أن موصلاً غير مشحون قد ادخل في المجال الكهربائي للمسعة ذات اللوحين المتوازيين ولكن من غير ان يلامس أياً من اللوحين . الذي يحدث هنا ، وكما ذكرنا اعلاه ، ان الشحنات الطليقة سوف تقوم باعادة تنظيم نفسها حال وضع الموصل في المجال ، ولكن دعنا نفترض لبرهة أن هذا لايحدث . فالذي يحدث هنا ان خطوط المجال الكهربائي سوف تخترق الموصل وتحت تأثير هذا المجال فان الالكترونات الحرة في الموصل سوف تتحرك باتجاه السطح الايسر تاركة بذلك الشحنات الموجبة على السطح الايمن . هذه الحركة سوف تستمر حتى يصبح المجال الكهربائي عند كل النقاط داخل الموصل ، والناشيء عن هذه الشحنات السطحية ، يساوي ويعاكس المجال الخارجي وبذلك تصبح محصلة المجال الكهربائي داخل الموصل صفراً وعندها تتوقف الشحنات عن الحركة .



الشكل (2 - 8) ادخال جسم موصل غير مشحون في المجال الكهربائي
(a) الشحنات المحثة والمجال المرافق لها
(b) محصلة المجال

لندرس الان سلوك العازل في نفس المجال . فالمعروف ان جزئيات العازل تتكون من شحنات موجبة وأخرى سالبة وكثيراً ما يكون مركز الشحنات السالبة منطبقاً على مركز الشحنات الموجبة لهذه الجزئيات . ولكن عندما تقع هذه الجزئيات تحت تأثير مجال

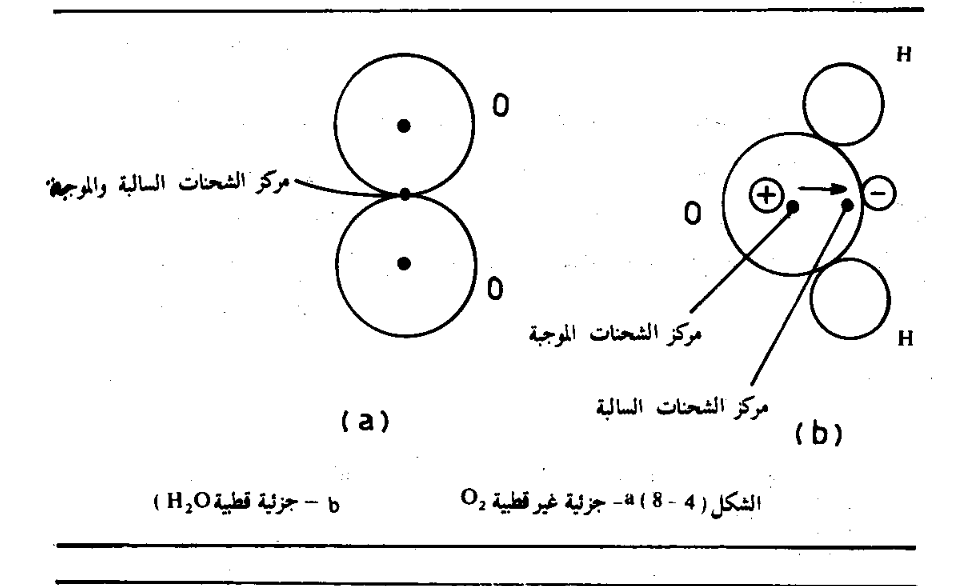
كهربائي خارجي فان الشحنات الموجبة سوف تنزاح باتجاه المجال بينما تنزاح الشحنات السالبه لهذه الجزئيات في الاتجاه المعاكس ، الشكل (3 - 8) . ونتيجة لذلك فان مركز الشحنات الموجبه لم يعد منطبقاً على مركز الشحنات السالبه بل تفصلها مسافة صغيرة وعندئذ نقول ان الجزيئة اصبحت مستقطبة بالحث (Polarized by induction) واكتسبت عزم ثنائي قطبي محتث (induced dipole moment) يرمز له بالحرف μ . ان هذا العزم المحتث سوف يزول بزوال المجال الكهربائي الخارجي ويعود مركز الشحنات السالبة لينطبق من جديد مع مركز الشحنات الموجبة .



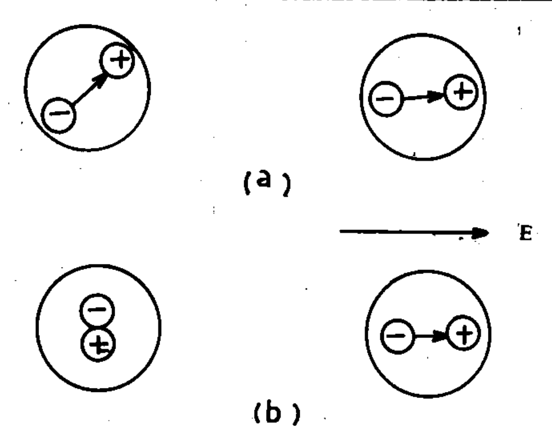
الشكل (3 - 8) ثنائي قطب محتث

ان جزئيات العازل التي تمتاز بهذه الصفة تدعى بالجزئيات الغير القطبية والامثلة عليها كثيرة نذكر منها جزيئات الهيدروجين والاوكسجين ، الشكل (4a - 8) . ومن جهة أخرى . هناك جزئيات لمواد عازله اخرى يكون فيها مركز الشحنات السالبة منفصلا بصورة دائمية عن مركز الشحنات الموجبة فهي مستقطبة على الدوام وهي لذلك تمتلك عزم ثنائي قطب دائم (Permenent dipole moment) وتدعى هده بالجزئيات القطبية (Polar molecules) ومن امثلتها جزئية الماء - الشكل (4b - 8) .

بالرغم من أن هذه الجزئيات القطبية تمتلك عزوما دائمية الا أن اتجاهات هذه العزوم تكون في الاحوال الاعتيادية ، عشوائياً ، بحيث ان محصلة العزوم الكلية تساوي صفراً . اما اذا وقعت هذه الجزئيات تحت تأثير مجال كهربائي خارجي فان هذا المجال سوف يعمل على تدوير هذه العزوم باتجاه المجال الشكل (5a - 8) ، وتزداد درجة التراصف لهذه الجزئيات باتجاه المجال كلما زادت شدة المجال الكهربائي وكذلك عند انخفاض درجة الحرارة .



الشكل (4 - 8) a- جزئية غير قطبية O_2 b – جزئية قطبية H_2O)

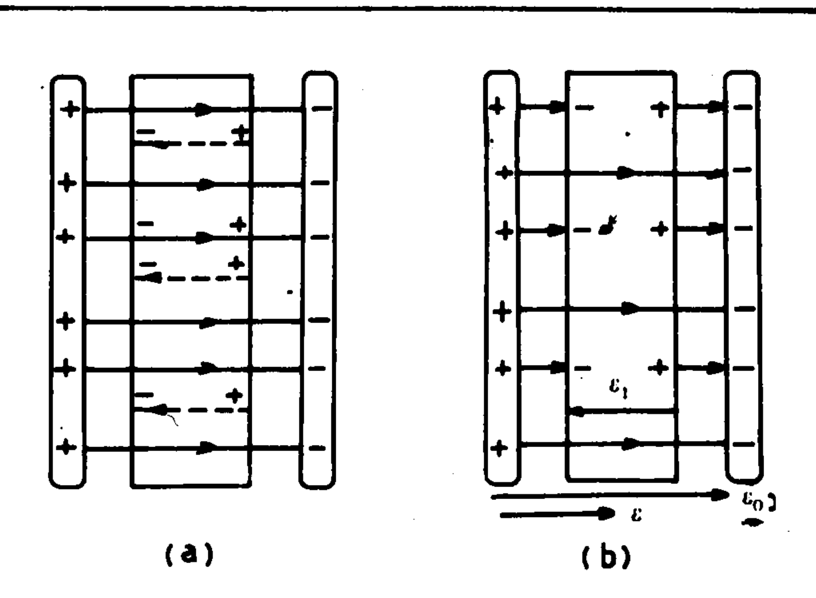


الشكل (5 - 8) a جزئية قطبية او ثنائية قطب ° ائم يد ور باتجاه المجال
b – جزئية غير قطبية تصبح ثنائي قطب محتث عند تسليط مجال خارجي

وسواء امتلكت الجزئية عزم ثنائي قطب دائم أم لم تمتلكه فانها سوف تكتسبه عن طريق الحث حال وضعها داخل مجال كهربائي خارجي ، وبهذا فان العازل ككل أو جزيئة العازل المنفردة تصبح مستقطبة (وبالرغم من كونها متعادلة كهربائيا) انظر الشكل (8 – 5b) . من المهم ان نتذكر هنا انه في عملية الاستقطاب لاتحدث عملية نقل

للشحنات كما يحدث في الموصل دائما انما هي ازاحة الالكترونات عن مواقع التوازن بمسافة تكون اقل بكثير من القطر الذري .

ان الشحنات السطحية المحتثة تظهر دائما بطريقة يكون معها المجال المحتث ε_1 معاكساً للمجال الخارجي ε_0 الشكل (6 - 8) . وبهذا فان محصلة المجال داخل العازل (ε) هي المجموع الجبري لكل من ε_1 , ε_0 وانها تشير بنفس اتجاه ε_0 ولكنها اصغر منه . لذا فان وضع العازل في مجال كهربائي سوف يعمل على اضعاف المجال الاصلي (الخارجي) داخل العازل .



الشكل (6 - 8) ادخال جسم عازل في المجال كهربائي لصفيحتين متوازيتين
a - الشحنات السطحية المحتثة والمجال المرافق لها b - محصلة المجال ($\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1$)

5 - 8 تأثير العوازل على سعة المتسعة : -

لاحظنا اعلاه ان وضع مادة عازلة بين لوحي المتسعة تؤدي الى اضعاف المجال الكهربائي لا الى الغائه ، وبهذا فأنه يسبب تناقصا في فرق الجهد بالرغم من بقاء الشحنة ثابتة لاتتغير وذلك استناداً الى العلاقة ($V = \varepsilon d$) . فاذا فرضنا ان فرق الجهد

بين اللوحين عند عدم وجود العازل هو (V_0) فان فرق الجهد (V) بعد وضع العازل يكون

$$V = \frac{\varepsilon_0}{\epsilon_r} = \frac{V_0}{\epsilon_r} \qquad \dots (8-17a)$$

أو أن

$$\epsilon_r = V_0 / V \qquad \dots (8-17b)$$

حيث تدعى ϵ_r بثابت العازل النسبي وهو عدد مجرد من الوحدات وتكون قيمته مساوية الى السماحية أو بصورة عامة الى ثابت العازل . فالمادة التي ثابت عزلها هو 2 في نظام الـ c.g.s سوف تمتلك سماحية نسبية 2 وسماحية مطلقة ϵ مقدارها $\epsilon_r\epsilon_0$ أي $2 \times 8.854 \times 10^{-12} = 17.708 \times 10^{-12}$ فراد / متر

وبأستخدام العلاقة $C = q/V$ ، يتضح تأثير وضع العازل بين لوحي المتسعة على قيمة السعة حيث تزداد الاخيرة بـ ϵ_r من المرات طالما ان شحنة المتسعة لا تتغير بادخال العازل. فاذا فرضنا ان C_0 تمثل سعة المتسعة ذات اللوحين المتوازيين عندما يكون الوسط بينهما هو الهواء فان مقدارها سيكون بعد وضع العازل . هو

$$C = {}_r C_0 \qquad \dots (8-18)$$

ويمكن كتابة المعادلة 18 - 8 من بالشكل التالي :

$$C = \epsilon_r \epsilon_0 L \qquad \dots (8-19)$$

حيث يعتمد L على شكل المتسعة وتكون وحداته وحدات طول . فعلى سبيل المثال يكون $L = A/d$ للمتسعة ذات اللوحين المتوازيين ويكون $L = 2\pi l / ln(b/a)$ للمتسعة الاسطوانيـــة .

6 - 8 الاستقطاب والاستقطابية

سبق ان ذكرنا في البند (4 - 8) ان درجة التراصف لعزوم الثنائيات القطبية في المواد العازلة تزداد بزيادة شدة المجال الـكهربائي الخارجي المسلط على هذه المواد . وبهذا فمن المناسب الافتراض ان عزم الجزيئة يتناسب مع شدة المجال الـكهربائـــي المسلط . اي ان

$$\mu = \alpha \varepsilon \qquad \dots (8-20)$$

حيث يدعى ثابت التناسب (α) باستقطابية الجزيئة . فاذا كان عدد الجزيئات في وحدة الحجوم هو N . وان كلا من هذه الجزيئات تمتلك عزماجزيئيا قدره μ . فان الاستقطاب P . الذي هو محصلة عزوم الثنائيات القطبية لوحدة الحجوم . سيكون

$$P = N\mu \qquad \ldots (8-21)$$

أو ان

$$P = N\alpha\varepsilon \qquad \ldots (8-22)$$

نعوض قيمة P في المعادلة 14 - 8 لـكي تصبح :

$$D = \epsilon_0 \varepsilon + N\alpha\varepsilon \qquad \ldots (8-23)$$

وعند التعويض عن قيمة D من المعادلة (15 - 8) في المعادلة (23 - 8) . فاننا نحصل على

$$\epsilon_r = \left(1 + \frac{N\alpha}{\epsilon_0}\right) \qquad \ldots (8-24)$$

تشير المعادلة (22 - 8) الى نتيجة مهمة وهي امكانية الربط بين كمية يمكن قياسها (ε_r) وكمية جزيئية ليس بالامكان قياسها عمليا او حسابها مباشرة وهي الاستقطابية الجزيئية α كذلك تشير هذه المعادلة الى انه في حالة كون (صفر = α) فان ($\epsilon_r = 1$) وهي قيمة السماحية النسبية للفراغ . وبهذا فان الاستقطاب لايمكن ان يحدث بدون وجود الوسط العازل .

عند التعويض عن $N = \frac{\rho N_A}{M}$. حيث ρ هي كثافة المادة العازلـة . N_A عدد افوكادرو و M الكتلة الجزيئية . في المعادلة (24 - 8) فاننا نحصل على

$$\epsilon_r = 1 + \left(\frac{\rho N_A}{M\epsilon_0}\right)\alpha \qquad \ldots (8-25)$$

يتضح من هذه المعادلة (25 - 8) . ان ϵ_r تزداد خطيا مع ازدياد الكثافة ρ هذا التغير لـ ϵ_r مع ρ يصح فقط في الغازات . كما تشير الى ذلك النتائج العملية . حيث ان كثافة الغازات تتغير على مدى واسع وبهذا فان المعادلة اعلاه لاتصلح لحساب ϵ_r في حالة المواد الصلبة او المواد السائلة ذات الـكثافات العالية . ان الاختلاف بين

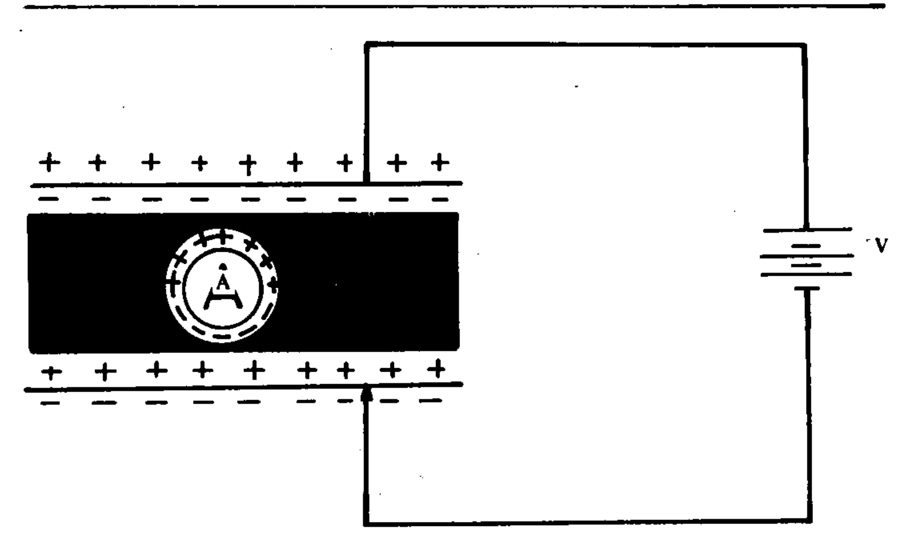
النتائج العملية المقاسة لـ ϵ_r وتلك المحسوبة من المعادلة (25 - 8) للمواد الصلبة يعود اساسا الى ان المجال الكهربائي المؤثر على الجزيئات، في المعادلة (22 - 8)، هو ليس بالضرورة ϵ دائما، وانما يجب ان يستبدل بمجال آخر يدعى بالمجال المحلي ϵ_{loc} او المجال الاستقطابـــي .

8 - 7 المجال المحلي

سبق لنا ان افترضنا ، وبتقريب جيد ، ان المجال المؤثر على الجزيئات في الغازات هو المجال الخارجي ϵ_0 . في المواد الصلبة وكذلك في بعض السوائل تكون المسافات البينية الفاصلة بين الذرات من مرتبة بعض الانكسترومات . وبذلك فان الذرات في هذه المواد لاتتأثر بالمجال الخارجي فقط وانما تتأثر ايضا بالمجالات الكهربائية الاخرى المتولدة بفعل الثنائيات القطبية المجاورة. وكنتيجة للمدى الطويل لقوى كولوم . فان هذه التاثيرات الاخرى لايمكن اهمالها . ان المشكلة الاساسية في نظرية العوازل السائلة منها والصلبة . هي حساب المجال الكهربائي المؤثر عند مواقع هذه الذرات . هذا المجال يدعى بالمجال المحلي (local field) ϵ_{loc} والذي يختلف عـــن المجال الخارجي ϵ_0 .

يتضح مما جاء اعلاه ان حساب المجال المحلي . الذي يؤثر على ثنائي قطب معين فـــي وسط عازل . يمكن ان يتم من خلال حساب التأثير الكلي للاستقطاب في الوسط العازل كله على هذا الثنائي القطبية . سناخذ هنا . على سبيل المثال : وسطاً عازلاً ذا تركيب بلوري مكعب وكذلك نتبع نفس الطريقة التي اقترحها لورنتز (Lorentz) لحساب المجال المحلي في المادة الصلبة الواقعة تحت تأثير مجال خارجي ϵ_0 .

لقد اقترح لورنتز ان ابسط طريقة لحساب قيمة ϵ_{loc} هو ان نفترض ان كرة صغيرة من المادة قد ازيلت من الوسط الذي تقع فيه مخلفة وراءها بذلك . فجوة كروية يقع الثنائي القطبية في مركزها . ويمثل هذا الاخير نقطة الاصل . كذلك افترض ان نصف قطر هذه الفجوة كبير . بالنسبة لقطر الذرة . بحيث ان المصفوفات من الثنائيات القطبية الواقعة خارج هذه الفجوة يمكن ان تعتبر كوسط متواصل (continum medium) انظر الشكل (7 - 8) .



الشكل (7 - 8) حساب المجال المحلي بطريقة ازالة كرة (A) داخل المادة العازلة

ان المجال المحلي عند النقطة A يمثل المجموع الجبري للمجالات الاربعة

$$\varepsilon_{loc} = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \qquad \dots (8-26)$$

حيث يمثل ε_0 المجال الخارجي العائد الى الشحنات الواقعة على السطح الخارجي للمتسعة . وذلك هو

$$\varepsilon_0 = D/\epsilon_0 \qquad \dots (8-27)$$

او ان

$$D = \epsilon_0 \, \varepsilon_0 \qquad \dots (8-28)$$

وعند التعويض عن قيمة D هذه في المعادلة (14 - 8) نحصل على

$$\varepsilon_0 = \varepsilon + P/\epsilon_0 \qquad \dots (8-29)$$

ε_1 هو المجال المسلط على الثنائي القطبية بسبب من الشحنات المستقطبة على سطحي الوسط العازل . ذلك هو ان

$$\varepsilon_1 = -\frac{P}{\epsilon_0} \qquad \dots (8-30)$$

ويدعى هذا المجال بمجال ازالة الاستقطاب (depolrization field)وذلك لانه يعاكس المجال الخارجي . ان قيمة هذا المجال تعتمد على الشكل الهندسي للسطح الخارجي ، وفي حالة صفيحة متناهية في الطول يكون هذا المجال مساويا الى $\left(- \frac{P}{\epsilon_0} \right)$

ε_2 يمثل شدة المجال عند النقطة A بسبب الثنائيات القطبية الاخرى الواقعة في فجوة لورنتز ، ويتم ايجاد قيمته من جمع المجالات للثنائيات المنفردة الواقعة في الفجوة باستخدام قانون كولوم . ان النتيجة النهائية سوف تكون معتمدة على التركيب البلوري للمادة الصلبة الواقعة تحت الدراسة ، وفي حالة البناء البلوري المكعب فان المجموع الجبري لهذه المجالات يساوي صفراً بسبب من التناظر ، ذلك هو ان ($\varepsilon_2 =$ صفر) .

ε_3 يمثل شدة المجال بسبب من الشحنات المستقطبة الواقعة على سطح فجوة لورنتز هذا وقد تم حساب ε_3 بواسطة لورنتز وكما يلي ! -

الشكل(8 - 8)يمثل رسماً مكبراً لفجوة لورنتز . فاذا كانت dA تمثل المساحة السطحية لمقطع دائري نصف قطره r تقع بين ϕ , $\phi + d\phi$ ، فان

$$dA = 2\pi r \sin\phi \, r \, d\phi \qquad \dots (8-31)$$

او ان

$$dA = 2\pi r^2 \sin\phi \, d\phi \qquad \dots (8-32)$$

الشحنة dq الواقعة على المساحة السطحية dA تكون مساوية الى المركبة العمودية للاستقطاب مضروبة بالمساحة السطحية ، ذلك هو ان

$$dq = P\cos\phi \, dA = 2\pi r^2 \, P \sin\phi \cos\phi \, d\phi \qquad \dots (8-33)$$

المجال العائد الى الشحنة (dq) عند النقطة A والذي يمثل $d\varepsilon_3$ في اتجاه ($\phi =$ صفر) يكون مساويا الى

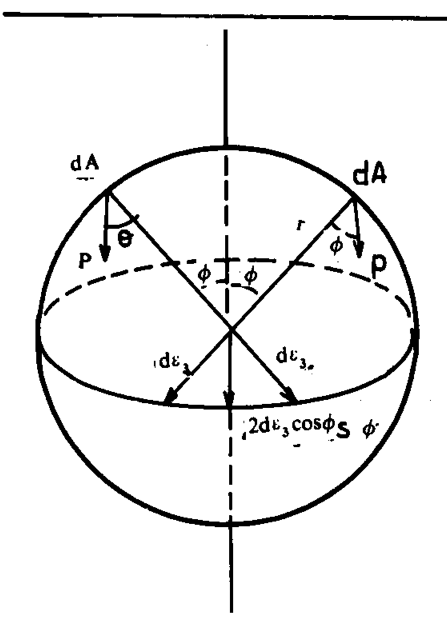
$$d\varepsilon_3 = \left(\frac{dq}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) (\cos\phi) \qquad \dots (8-34)$$

وبالتعويض عن dq من المعادلة (8 - 33) في المعادلة (8 - 34) ، نحصل على

$$d\varepsilon_3 = \frac{P\cos\phi}{4\pi \varepsilon_0 r^2} . 2\pi r^2 \sin\phi \cos\phi \, d\phi \qquad \dots (8-35)$$

وبعد التبسيط ، نجد ان

$$d\varepsilon_3 = \frac{P}{2\epsilon_0} \cos^2\phi \sin\phi \, d\phi \qquad \dots (8-36)$$



الشكل (8 - 8) صورة مكبرة لفجوة لورنتز

لذا فان المجال الكلي ε_3 بسبب مجموع الشحنات الكلي المتراكم على السطح الخارجي للفجوة والذي يمكن الحصول عليه بواسطة التكامل ، حيث ان حدود التكامل هو من صفر = ϕ الى $\phi = \pi$ ، اي ان

$$\varepsilon_3 = \int_0^{\pi} \frac{P}{2\epsilon} \cos^2\phi \sin\phi \, d\phi \qquad \dots (8-37)$$

او ان

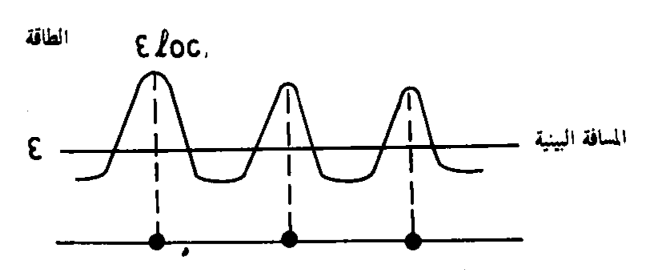
$$\varepsilon_3 = -\frac{P}{6\epsilon_0} (\cos\phi)^3 \Big|_0^{\pi} = \frac{P}{3\varepsilon_0} \qquad \dots (8-38)$$

وعند التعويض عن قيم كل من ε_0 , ε_1, ε_2, ε_3 ، في المعادلة (24 - 8) نحصل على

$$\varepsilon_{loc} = \varepsilon + \frac{P}{3\varepsilon_0} \qquad \dots (8-39)$$

ان الفرق بين المجال ε ، والذي يعرف بمجال ماكسويل (Maxwell field) وبين المجال المحلي ε_{loc} هو ان الاول يعتبر مجالاً يمكن قياسه ، ذلك ان هذا المجال يمثل معدل القيمة لعدد من المجالات الواقعة على عدد كبير من الجزيئات وبهذا فانه يظهر ثابتاً خلال الوسط – انظر الشكل (9 - 8) . من جهة اخرى ، يعتبر المجال المحلي ε_{loc}

مجالاً مكرسكوبي ، لا يمكن تحديد قيمته ، وذلك لان هذا المجال يتغير بشكل كبير داخل الوسط العازل – الشكل (9 – 8) – يلاحظ ان قيمة هذا المجال هي اكبر مايمكن عند مواقع الجزيئات وبهذا فان الجزيئات تكون مستقطبة بشكل اكبر عند وجود هذا المجال .



الشكل (9 - 8) الفرق بين مجال ماكسويل (ε) والمجال المحلي ε_{loc} ، الدوائر تمثل مواقع الجزيئات

دعنا الان نستخرج ثابت العازل للمواد الصلبة من المعادلة (20 – 8) ، حيث $P = N\alpha\varepsilon$ ولكن بعد استبدال ε بـ ε_{loc} . اي

$$P = N\alpha\varepsilon_{loc} \qquad \dots (8-40)$$

وبعد التعويض عن ε_{loc} من المعادلة (39 – 8) نحصل على

$$P = \left(\frac{N\alpha}{1 - \dfrac{N\alpha}{3\epsilon_0}} \right)\varepsilon \qquad \dots (8-41)$$

يلاحظ في المعادلة اعلاه ان المقام هو اقل من واحد مما يعزز المساهمة الاستقطابية . ان هذه الزيادة في الاستقطاب هي بسبب استخدام ε_1 بدلا من ε . وعند التعويض عن P هذه في المعادلة (15 – 8) سوف نجد ان ثابت العازل للمواد الصلبة يعطي بواسطة

$$\epsilon_r = \left(\frac{1 + \dfrac{2}{3\epsilon_0} N\alpha}{1 - \dfrac{N\alpha}{3\epsilon_0}} \right) \qquad \dots (8-42)$$

وغالبا ما تكتب المعادلة اعلاه بالصيغة التالية :

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0} \qquad \ldots (8 - 43)$$

والتي تدعى بعلاقة كلاوس – موستا . كذلك بالامكان كتابة هذه المعادلة بالصيغة

$$\frac{M}{\rho} \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) = \frac{N_A \alpha}{3\epsilon_0} \qquad \ldots (8 - 44)$$

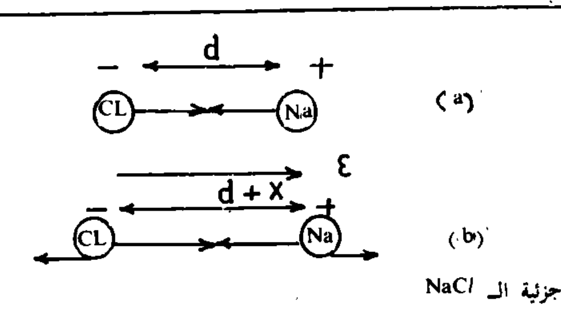
والتي توضح ان خاصية الاستقطاب (α) يمكن حسابها من كميات بالامكان قياسها ϵ_r ، ρ ، M وان الحد الذي على يمين المعادلة (44 - 8) يدعى بالاستقطابية المولية (molar Polarizability) .

8 - 8 مصادر الاستقطاب

يحدث الاستقطاب في كل المواد ، ذلك لان حدوثه يرتبط بوجود الجزيئات التي هي بمثابة طابوق البناء لهذه المواد . فعندما يؤثر المجال الكهربائي على مثل هذه الجزيئات ، فان الشحنات الموجبة (النوى) سوف تنحاز باتجاه المجال بينما تنحاز الشحنات السالبة (الالكترونات) بالاتجاه المعاكس لاتجاه المجال ، وبهذا فان النتيجة هي فصل الشحنات المتعاكسة عن بعضها اي : استقطاب الجزيئة . مما تقدم يتبين لنا ان الاستقطاب يعتمد على بناء الجزيئات نفسها وبهذا فاننا نستطيع القول انهناك انواعا مختلفة من الاستقطاب تبعا لتركيب الجزيئات المستقطبة في المواد . فاذا امتلكت الجزيئات عزما دائميا حتى في حالة غياب المجال الكهربائي فتدعى بالجزيئات الثنائية القطبية او المواد الثنائية القطبية . في هذه المواد وبالرغم من حقيقة ان الجزيئات المنفردة فيها تمتلك عزوما دائمية ، فان صافي الاستقطاب يكون صفراً بسبب ان العزوم الجزيئة تكون عشوائية الاتجاهات مما يؤدي الى الغاء عزوم بعضها البعض الاخر . اما عند تسليط المجال على هذه المواد فان الثنائيات القطبية سوف تميل باتجاه المجال ، وكما نوهنا في السابق ، مؤدية الى بروز استقطابية تدعى باستقطابية الثنائيات القطبية او الاتجاهية (α_d) .

اما في حالة امتلاك الجزيئة على اواصر ايونية ، فان المجال يعمل عندئذ على زيادة اطوال هذه الاواصر وذلك عن طريق ازاحة الايون الموجب(Na^+)، كما هي عليه الحال في جزيئة $NaCl$ ، الى اليمين والايون السالب Cl^-)الى اليسار – انظر الشكل(10 - 8) مؤديا بذلك الى زيادة طول الاصرة الايونية . ان النتيجة لهذا التغير هو توليد عزم ثنائي

قطبي صافي في الجزيئة لم يكن موجوداً في السابق . وحيث ان الاستقطاب هنا هو بسبب الازاحة النسبية للايونات ذات الشحنات المتعاكسة وتدعى هذه العملية بالاستقطابية الايونية (α_i) .

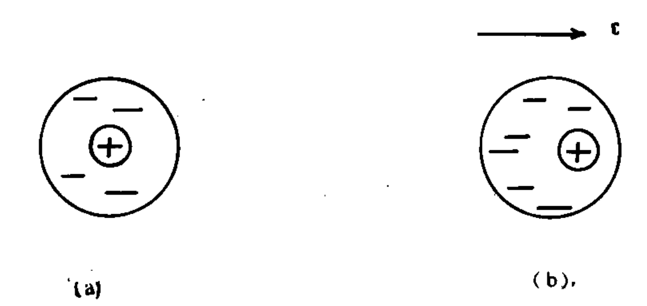


الشكل (10- 8) a- قبل تسليط المجال b – بعد تسليط المجال وحصول الاستقطاب الايوني

النوع الثالث من الاستقطاب يحدث بسبب من الاستقطاب الذاتي للجزيئات والذرات نفسها بواسطة المجال . وذلك هو ان الالكترونات في المدارات الذرية سوف تنزاح الى اليسار بالنسبة الى النواة انظر الشكل (11 - 8) . هذا النوع يدعى الاستقطابية الالكترونية (α_e) .

مما جاء اعلاه ، يصح القول ان الاستقطابية الكلية (α) هي

$$\alpha = \alpha_d + \alpha_i + \alpha_e \qquad \ldots (8 - 45)$$



الشكل(11 – 8)الاستقطاب الالكتروني (a) ذرة غير مستقطبة (b) ذرة مستقطبة بفعل المجال

لك هو ان (α) تمثل المجموع الكلي للمساهمات الثنائية القطبية ، الايونية والالكترونية. ومع ان الاستنطابية الالكترونية تصاحب كل المواد الا ان حضور الاستقطابية الايونية او الثنائية القطبية يعتمد على نوع المادة الواقعة تحت تأثير المجال . فالاستقطابية الايونية تتواجد عادة في المواد الايونية بينما تتواجد الاستقطابية الثنائية في المواد الثنائية القطبية من جهة اخرى ، في البلورات التساهمية مثال ذلك السليكون والجرمانيوم والتي هي ليست ايونية اوثنائية القطبية فان الاستقطاب لا يعدو عن كونه، في هذه المواد ، الكترونيا

ان دراسة الاستقطابية المختلفة وايجاد القيم النسبية لكل منها سوف يزودنا بمعلومات مهمة حول البناء الذري الداخلي للمواد المختلفة . اما مسالة التميز بين الانواع المختلفة للاستقطابية فيتاتى من حقيقة ان لكل منهما سماتها الخاصة التي تميزها عن الاخرى فالاستقطابية الثنائية على سبيل المثال ، تظهر اعتمادا قويا على درجة حرارة المادة خلافا للاستقطابيتين الايونية والالكترونية

لهذا كله ولغرض التعرف على خصائص كل منهما بصورة اكثر تفصيلا ، سنحاول الان ان نوضح الكيفية التي يتم بها حساب هذه الاستقطابيات الثلاث كل على انفراد :—

a — الاستقطابية الالكترونية Electronic Polarizability

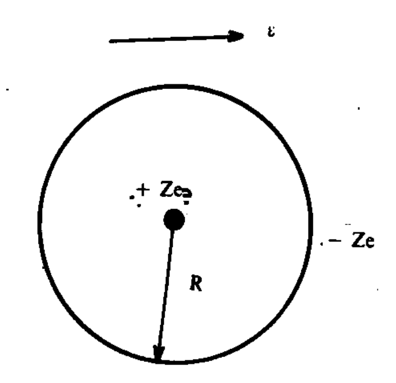
تعرف الاستقطابية الالكترونية على انها اجهاد في الذرة ، ولدراسة الاجهاد في الذرة بسبب من تسليط المجال الكهربائي ، علينا ان نختار نموذجا معينا للذرة . سناخذ هنا النموذج الكلاسيكي ، نموذج بور للذرة ، وسنقتصر عليه ، ذلك لان النتيجة النهائية لكلا النموذجين ، الكلاسيكي والكمي ، هي واحدة . كذلك سنفترض ان التفاعل بين الثنائيات القطبية المتجاورة معدوم . لذا فان المعالجة الرياضية الحالية هي صحيحة فقط في حالة الغازات التي تكون فيها المسافات البينية بين الذرات كبيرة نسبيا ولذلك يمكن اهمال التفاعل بين الذرات .

طبقا لنظرية بور فان النواة في الذرة المعزولة تحتوي على (Ze) من الشحنات الموجبة . وللحفاظ على تعادل الذرة ، يفترض ان هناك Z من الالكترونات تدور حول النواة . ولنفترض ان الشحنات الالكترونية ($-eZ$) موزعة بانتظام خارج النواة وفي حجم كرة نصف قطرها R ، الشكل (12-8) .حيث يمثل R نصف قطر الذرة .

الكثافة الحجمية للشحنة الالكترونية (ρ) يعبر عنها بواسطة

$$\rho = -\frac{Ze}{4\left(\frac{\pi}{3}\right)R^3} \quad \ldots (8-46)$$

عند وضع مثل هذا النموذج الذري في مجال كهربائي على افتراض ان الذرة ، لا تمتلك الكترونات حرة قادرة على الانقلاب تحت تاثير المجال ، الا ان الذي يحدث هنا هو ان النواة والالكترونات سوف تتاثران بقوتين متعاكستين الاتجاه (يمتلكان شحنات متعاكسة) تعملان على ازاحة النواة باتجاه المجال والالكترونات في الاتجاه المعاكس . وعليه فان النتيجة هي فصل مركز الشحنات لكل من النواة والالكترونات عن بعضها مؤدية بذلك الى استقطاب الذرة.



الشكل(12- 8)رسم تخطيطي للذرة

من جهة اخرى فان قوى الجذب الكهروستاتيكية بين الالكترونات والنواة سوف تحاول اعادة كل منهما الى وضعهما السابق وبهذا فان حالة من التوازن تتولد ولكن هذه المرة يكون للذرة عزم ثنائي محتث ويكون مساويا الى

$$\mu_e = \alpha_e \varepsilon \quad \ldots (8-47)$$

حيث تمثل α_e الاستقطابية الالكترونية . للحصول على فكرة ما عن قيمة (α_e) ، دعنا نفترض ان الازاحة النسبية للنواة كانت d انظر الشكل (13 – 8) . ان القوة الاسترجاعية ، قوى كولوم ، التي تؤثر على النواة بسبب من وجود الشحنة السالبة ρ . $\left(\frac{4}{3}\pi\right)d^3$ الواقعة في كرة نصف قطرها d هي

$$F = \frac{(Ze\, d^3)\, Ze}{4\pi \epsilon_o d^2 R^3} = \frac{Z^2 e^2 d}{4\pi \epsilon_o R^3} \quad \ldots (8-48)$$

في حالة التوازن لدينا ان

$$Ze\varepsilon = \frac{Z^2 e^2 d}{4\pi \epsilon_o R^3} \quad \ldots (8-49)$$

او ان

$$4\pi \varepsilon R^3 \epsilon_o = Zed \quad \ldots (8-50A)$$

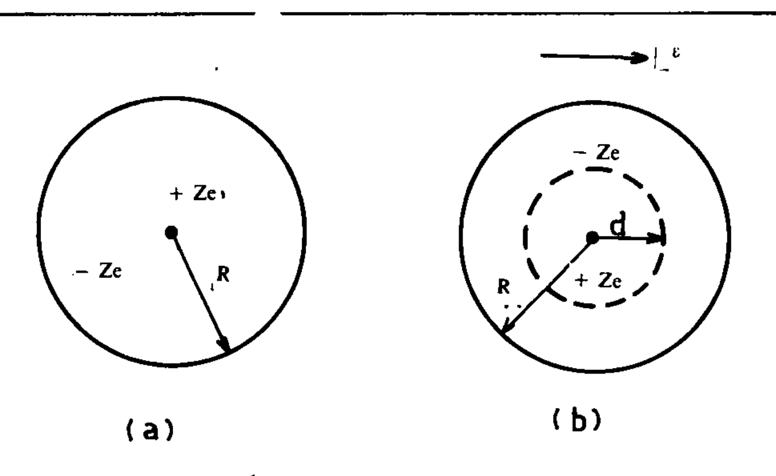
وحيث ان

لذا فان

$$\mu = \alpha_e \varepsilon = Zed$$

$$\alpha_e = 4\pi \epsilon_o R^3 \quad \ldots (8-50B)$$

اي ان α_e تتناسب طرديا مع R^3 وان وحداتها هي وحدات حجم لذا فان قيمة α_e تكون من مرتبة 10^{-24} سم^3 في حالة كون R يساوي 10^{-8} سم



الشكل (13- 8) نموذج ذري للاستقطاب الالكتروني

a – بدون وجود المجال الكهربائي

b – عند تسليط المجال الكهربائي

b الاستقطابية الايونية Ionic Polarization

بالامكان التعبير عن الاستقطابية الايونية ، كما هو الحال في الاستقطابية الالكترونية بانها اجهاد الكتروني يتولد في مركب كيمياوي يمتلك الصفة الايونية ويتم حدوثه عند وقوع هذا المركب تحت تاثير مجال كهربائي . دعنا ناخذ مركبا ايونيا نموذجيا هو كلوريد الصوديوم (NaCl) في هذا المركب يمتلك الصوديوم (11) الكتروناً حول النواة بينما يمتلك الكلور (17) الكتروناً حول النواة ، وبهذا فان المدار الاكثر بعدا في ذرة الصوديوم يحتوي على الكترون واحد يقضي معظم وقته بالقرب من نواة الكلور مؤدياً بذلك الى جعل الصوديوم موجبا والكلور سالبا . وحيث ان الاصرة بين ايون الصوديوم وايون الكلور هي ايونية في طبيعتها ولهذا فانه حتى في حالة غياب المجال الكهربائي فان ذرتي ايون الصوديوم Na^+ والكلور Cl^- تكون مفصولتان عن بعضهما بمسافة مكونة بذلك عزم ثنائي قطب دائم يساوي حاصل ضرب الشحنة في المسافة الفاصلة بين الايونين .

اما في حالة تسليط المجال الكهربائي ε فان الايون الموجب سوف ينزاح باتجاهه بينما ينزاح الايون السالب بعكس الاتجاه مسببا بذلك الى زيادة في طول الاصرة الايونية ان هذا التغير في المسافة الفاصلة بين الايونين يؤدي الى ظهور استقطابية اضافية في الجزيئات الايونية والتي تدعى بالاستقطابية الذرية او الايونية وذلك لانه يحدث نتيجة للازاحة الحاصلة في الذرات نفسها داخل الجزيئة . العزم الثنائي المستقطب (μ_i) والناتج عن الازاحة المرنة للايونات داخل الجزيئة يمكن التعبير عنه كذلك بواسطة المعادلة (47 - 8) ولكن مع استبدال الـ α_e بـ α_i لذا فان

$$\mu_i = \alpha_i \varepsilon \qquad (8 - 51)$$

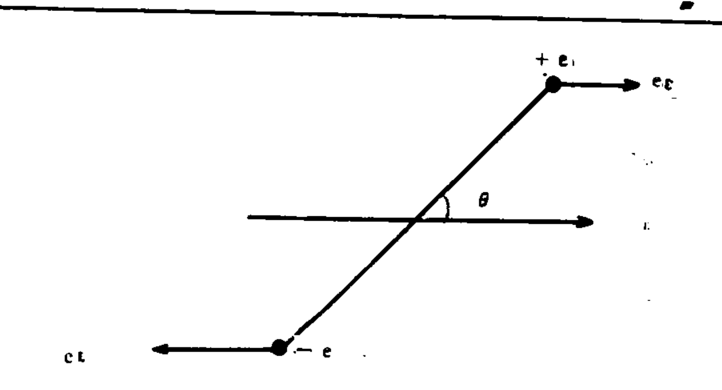
على اية حال . تكون α_i . كما سنرى لاحقاً . ثابتة عند الترددات الواطئة وتكون قيمتها لمعظم الجزيئات بحدود 10 % من قيمة α_e .

c - الاستقطابية الاتجاهية Orientational Polacization

سنحاول هنا دراسة الاستقطابية الاتجاهية الناشئة بسبب التغير الذي يحدث في اتجاهات الثنائيات القطبية الدائمة تحت تاثير مجال خارجي ثابت القيمة (D. C) وسنقتصر في دراستنا هنا على الحالات التي تكون فيها الجزيئات حرة الحركة وكذلك على افتراض ان التفاعل بين هذه الجزيئات يمكن اهماله . ذلك هي حالتا السوائل والغازات .

لقد تناول ديباي (Deby) عام 1912 هذا الموضوع بالبحث فاثبت انه اذا افترضنا ان الجزيء يمكن ان يكون له عزما ناشئاً عن ثنائي قطب دائم فانه يمكن بذلك تفسير ارتفاع قيم ثوابت العازل للماء والكحول والسوائل المشابهة لها . كذلك يصبح بالامكان تفسير العلاقة بين تغير ثابت العازل ودرجة حرارة المادة .

فاذا اخذنا على سبيل المثال ، حالة غاز يحتوي على عدد كبير من الجزيئات ، كل منها يمتلك عزم ثنائي دائم (μ_d) .فان اتجاه هذه الثنائيات سوف تكون عشوائية في حالة عدم وجود مجال خارجي وبهذا فان النتيجة هي انعدام هذا العزم الثنائي القطبي ذلك لان المحصلة النهائية لجميع هذه العزوم سوف تكون صفرا . اما في حالة تسليط مجال كهربائي خارجي فان هذا المجال سوف يعمل عندئذ ، على تدوير هذه العزوم باتجاهه – انظر الشكل (14 - 8) مؤدياً بذلك الى ظهور استقطابية تعرف بالاستقطابية الاتجاهية او الاستقطابية الثنائية القطبية .



الشكل (14– 8)الزخم الزاوي الناتج من تسليط المجال الخارجي (ε) على الثنائي القطبية

ان التاثير الذي يحدثه المجال الكهربائي على الثنائيات القطبية للانتظام في اتجاه واحد سوف يقابل بالطاقة الحركية الكبيرة لهذه الجزيئات ، خاصة عند الدرجات الحرارية العالية ، والتي تعمل على زيادة اهتزاز الذرات حول مواقعها في الشبيكة . عليه فان السوال هو:– ما هومعدل قيمة حركية العزم الثنائي لكل جزيء . في اتجاه المجال المسلط ، عند الدرجة الحرارية T ؟ للاجابة على هذا السؤال سوف نفترض ان الثنائي القطبية يمتلك حرية الدوران . لذا فاننا والحالة هذه بصدد مسألة بسيطة من مسائل الميكانيك الاحصائي .

طبقا للميكانيك الاحصائي ، فان الاحتمالية للثنائي القطبية لعمل زاوية تقع بين θ و $\theta + d\theta$, مع المجال الكهربائي تتناسب مع

$$2\pi \sin\theta \, d\theta \exp \{ (\mu\varepsilon \cos\theta) / K_B T \} \qquad \ldots (8-52)$$

حيث تمثل $2\pi \sin\theta d\theta$ الزاوية المجسمة الواقعة بين θ , $\theta + d\theta$ وبما ان الطاقة الكامنة لثنائي القطبية يعمل زاوية θ مع المجال المسلط ε ، الشكل (8 - 14) هي :-

$$- \mu . \varepsilon = - \mu \varepsilon \cos\theta \qquad \ldots (8-53)$$

لذا فان معدل القيمة لمركبة العزم الثنائي القطبية باتجاه المجال تكون مساوية الى

$$\mu \langle \cos\theta \rangle = \frac{\int_0^\pi \mu \cos\theta \sin\theta \, d\theta \exp \{ (\mu\varepsilon \cos\theta) / K_B T \}}{\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \exp \{ (\mu\varepsilon \cos\theta / K_B T) \}}$$

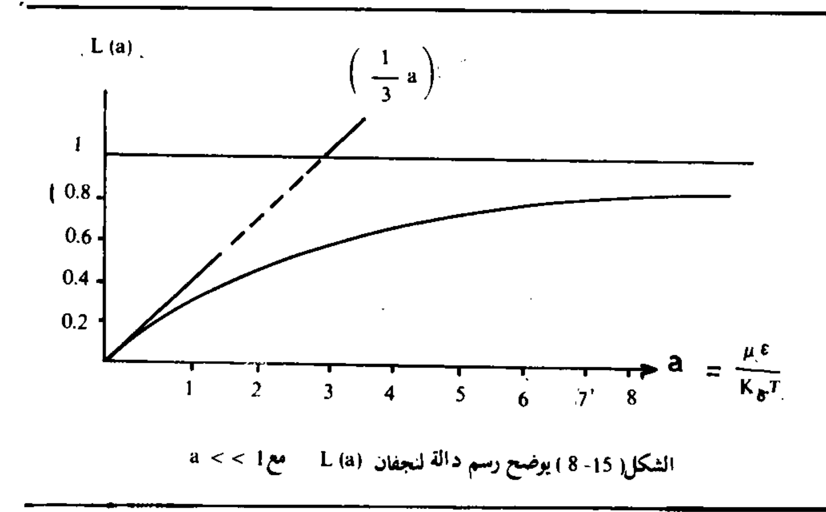
لحساب هذا التكامل دعنا نفترض أن

$$(\mu\varepsilon / K_B T) \cos\theta = x \quad \text{وكذلك} \quad (\mu\varepsilon / K T) = a$$

وبعد التبسيط نحصل على

$$\langle \cos\theta \rangle = \frac{1}{a} \frac{\int_{-a}^{+a} x e^x \, dx}{\int_{-a}^{+a} e^x \, dx} = \frac{e^a + e^{-a}}{e^a - e^{-a}} - \frac{1}{a} = L(a) \qquad \ldots (8-55)$$

الدالة $L(a)$ تدعى بدالة لنجفان (Langevin function) . في الشكل (8 - 15) . رسمت الداله $L(a)$ كداله $a = \mu\varepsilon / K_B T$ لاحظ أن قيمة $L(a)$ تصل قيمة الاشباع (الواحد) عندما تكون a كبيره اي عندما يكون المجال الكهربائي المسلط ε كبيرا جداً . هذا يعني الانحياز الكامل للثنائي القطبية باتجاه المجال اوان $\mu = \mu \langle \cos\theta \rangle$. من جهة اخرى . عندما تكون شدة المجال غير كبيرة وكذلك درجة الحرارة



الشكل(15- 8) يوضح رسم دالة لنجفان L (a) مع $a << 1$

ليست مرتفعة فان $a << 1$ او ان $\mu\varepsilon << K_B T$. تحت هذه الظروف تكون $L(a) = \frac{a}{3}$ وبذلك فان :

$$\mu < \cos\theta > = (\mu^2 / 3K_B T)\, \varepsilon \qquad \ldots (8 - 56)$$

وحيث أن $P = \mu N$، لذا فاننا نستطيع القول ان

$$P_d = \frac{N\mu^2}{3K_B T}\varepsilon \qquad \ldots (8 - 57)$$

من المعادلة (57 - 8) يتوضح ان الاستقطاب الاتجاهي يتناسب طرديا مع شدة المجال الكهربائي المسلط ε وعكسيا مع درجة حرارة المادة كذلك يتناسب مع مربع العزم الثنائي القطبية الدائمي .

وباستخدام المعادلة (22 - 8) نجد ان الاستقطابية الاتجاهية هـي : -

$$\alpha_d = \mu^2 / 3 K_B T \qquad \ldots (8 - 58)$$

ان وحدات القياس لعزم ثنائي القطبيـــة هي الديباي . ذلك هوان ($1D = 3.33 \times 10^{-30}$ coulom)

بقي ان نذكر اخيرا ان الاستقطاب الكلي . الذي يشتمل على الانواع الثلاث للاستقطاب .هو

$$P = P_e + P_i + P_d \qquad \ldots (8 - 59)$$

وعند التعويض عن $P = N\alpha$ وكذلك عن قيمة α_d من المعادلة (22) نجد ان

$$P = N(\alpha_e + \alpha_i + \mu^2 / 3K_BT)\varepsilon \quad ...(8-60)$$

لدينا من المعادلة (17 - 8) ان

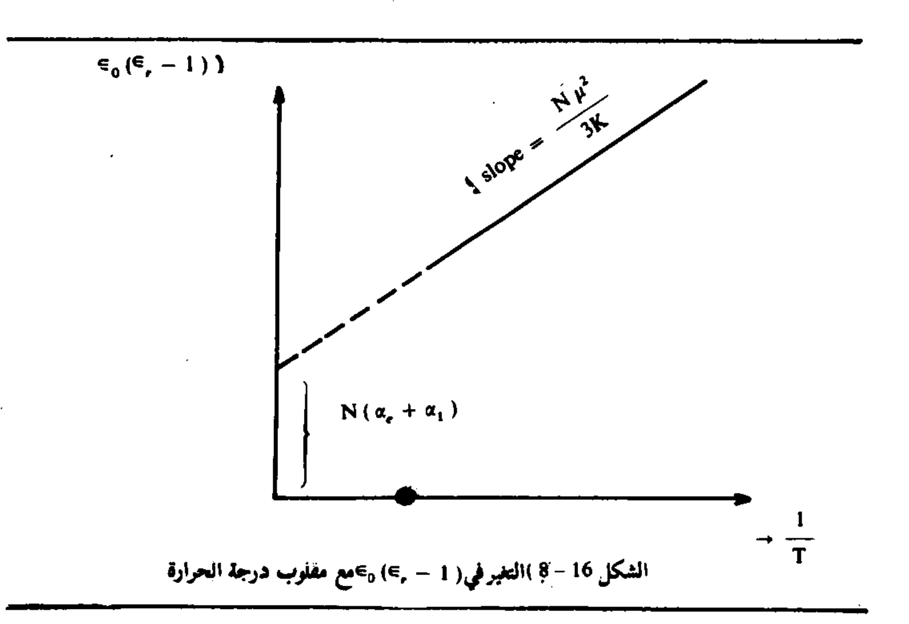
$$P = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\varepsilon$$

وعند المساواة نحصل على

$$\epsilon_0(\epsilon_r - 1) = N(\alpha_e + \alpha_i + \mu^2 / 3K_BT) \quad ...(8-61)$$

تشير المعادلة (61 - 8) ان تغير $(\epsilon_r - 1)$ مع $\frac{1}{T}$ هو تغير خطي ، وبذلك فانه يصبح بالامكان التحقق من وجود الثنائي القطبية الدائم في المادة من خلال قياس ثابت العازل النسبي للغاز او السائل كدالة لدرجة الحرارة . وعند رسم $\epsilon_0(\epsilon_r - 1)$ على المحور الصادي وعلى المحور السيني $\frac{1}{T}$ فان انحدار الخط المستقيم الشكل (16 - 8) سوف يساوي $\frac{N\mu^2}{3K_BT}$ وحيث أن K_B هو ثابت و N يسهل حسابه ، لذا فانه يصبح بالامكان حساب العزم الثنائي القطبية μ كذلك من الممكن حساب $(\alpha_e + \alpha_i)$ ، حيث ان تقاطع الخط المستقيم مع $\epsilon_0(\epsilon_r - 1)$ يساوي $N(\alpha_i + \alpha_e)$

ومع ان المعادلة (28 - 8) خاصة بالمواد الغازية والسائل الا انه بالامكان استخدامها مع المواد الصلبة بشرط استبدال ε بـ ε_{loc} .



الشكل (16 - 8) التغير في $\epsilon_0(\epsilon_r - 1)$ مع مقلوب درجة الحرارة

د – الاستقطابية المصطنعة :

تتميز الاستقطابيات الثلاث التي مر ذكرها ، الالكترونية والايونية والاتجاهية بأن منشأها واحد وهو وجود الشحنات المرتبطة مع الذرات أو الجزئيات أو تلكم الشحنات الداخلة ضمن التركيب الذري لتلك المواد الصلبة منها والسائلة .

من جهة اخرى ، توجد في معظم البلورات عيوب – قد تكون على شكل ذرات شائبة أو فراغات في البلورة أو فقاعات هوائية في سائل أو مناطق غير متجانسة في المادة وقد تتخلل المادة حواجز تنجم عن هذه العيوب أو قد تكون الحواجز ناجمة عن وجود شقوق .

ان وقوع هذه الشوائب تحت تأثير مجال كهربائي ولكونها مشحونه ، سوف يمكنها من الانتقال خلال البلورة مما يجعلها سهلة الاصطياد من قبل العيوب الاخرى أو انها تتراكم عند هذه العيوب وبالتالي فانها تؤدي الى خلق تراكم محلي للشحنات والتي تعمل على بحث الشحنات معاكسة في الجهة الاخرى مؤدية بذلك الى نشوء ثنائيات قطبية في المادة ان هذه الثنائيات سوف لاتقتصر على ذرة واحدة أو جزيئة بل تمتد ضمن مناطق كبيرة في المادة وتعتمد على تجانس المادة ومدى خلوها من العيوب أو الشوائب بخلاف الاستقطابيات الاخرى التي تعتمد على التركيب الكمياوي للمادة ومكوناتها وسمى هذه الاستقطابية بالاستقطابية المصطنعة وتحدث في الترددات الدقيقة وقد تمتد حتى الترددات الواطئة جداً ودون الموجات السمعية وذلك تبعاً لنوع العيوب أو فقد التجانس المسبب للاستقطاب .

9 – 8 ثابت العازل للمواد الصلبة والسائلة : –

بعد ان تمت دراسة انواع الاستقطابيات التي تظهر في المواد العازلة فانه يصبح بالامكان تصنيف هذه المواد على اساس من هذه الاستقطابيات الى ثلاثة اقسام : –

(a)– مواد تمتلك استقطابية الكترونية (مواد غير ايونية وغير قطبيــة) .

هذه المواد تتكون من نوع واحد من الذرات مثال ذلك الماس والكبريت والجرمانيوم وتكون خالية من الايونات وكذلك الثنائيات القطبية الدائمة وعليه فان الاستقطابية الوحيدة التي تظهر في هذه المواد هي الاستقطابية الالكترونية α_e ومن ثم فأن .

$$P = N\alpha_e \varepsilon_i \qquad \dots (8-62)$$

لدينا من المعادلة 16 – 8 ان

$$P = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \varepsilon_i \qquad \dots (8-16)$$

ومن المعادلة (37 – 8) أن

$$\varepsilon_i = \varepsilon + \frac{P}{3\epsilon_0} = \varepsilon + \frac{\epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \varepsilon}{3\epsilon_0}$$

أو أن

$$\varepsilon_i = \varepsilon + \frac{\epsilon_r \varepsilon}{3} - \frac{\varepsilon}{3} \qquad \dots (8-63)$$

أي أن

$$\varepsilon_i = \left(\frac{\epsilon_r + 2}{3} \right) \varepsilon \qquad \dots (8-64)$$

وعند التعويض عن قيمة P من المعادلة (16 – 8) وعن ε_i من المعادلة (64 – 8) في المعادلة (62 – 8) نحصل على

$$P = N\alpha_e \left(\frac{\epsilon_r + 2}{3} \right) \varepsilon = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \varepsilon \qquad \dots (8-65)$$

أو أن

$$\frac{N\alpha_e}{3\epsilon_0} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \qquad \dots (8-66)$$

هذه المعادلة تعرف بمعادلة كلاوس–موستا وهي تربط بين الاستقطابية المولية أي الاستقطابية لكل مول من الماده وبين ثابت العازل النسبي . أي تربط بين كمية لايمكن قياسها وبين كمية يمكن قياسها وهي تصلح تماما في الغازات وكذلك السوائل حيث تكون الجزيئات متباعدة عن بعضها الاخر ويكون تأثير بعضها على الاخر مهملاً .

(b) مواد ايونية ولكن غير قطبية : –

تحتوي هذه المـــواد عـلى نوعين من الذرات كما هو الحال في بلورة كلوريد الصوديوم ولكنها لاتحتوي على ثنائيات قطبية دائمية ومن ثم فان الاستقطابية التي تظهر في هذه المواد تكون على نوعين :– أيونية والكترونية :

إن سلوك هذه المواد يعتبر معقداً نوعا ما ، فعلى سبيل المثال يكون المجال المحلي عند مواقع الشحنات الموجبة مختلفا عن قيمة المجال عند الايون السالب . وطبقا لما جاء اعلاه ، فان ثابت العازل النسبي الساكن ε_r يرتبط مع الاستقطاب بالعلاقة

$$P = N(\alpha_e + \alpha_i)\,\varepsilon_i \qquad \dots(8-67)$$

وقد سبق أن أثبتنا أن :

$$P = \varepsilon_0(\varepsilon_r - 1)\,\varepsilon$$

وأن

$$\varepsilon_i = \left(\frac{\epsilon_r + 2}{3}\right)\varepsilon$$

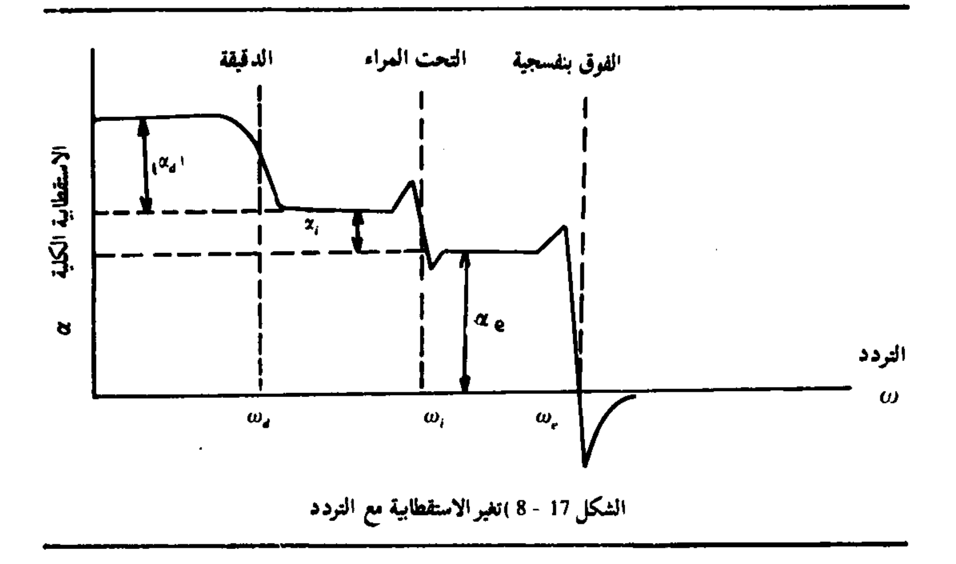
وعند التعويض نحصل على

$$N(\alpha_e + \alpha_i)\left(\frac{\epsilon_r + 2}{3}\right)\varepsilon = \epsilon_0(\epsilon_r - 1)\,\varepsilon \qquad (8-68)$$

أو أن

$$\frac{N(\alpha_e + \alpha_i)}{3\epsilon_0} = \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \qquad \dots(8-69)$$

لابد لنا ان نذكر ان الاستقطابية الايونية في هذه المواد ، تشكل جزءا مهما من الاستقطابية الكلية (الايونية + الالكترونية) وان تأثير هذه الاستقطابية يبدأ بالاضمحلال انظر الشكل (17 – 8) عندما يزيد التردد على 10^{15} هيرتز، حيث لايمكن للايونات عند هذه الترددات من متابعة التغير السريع للمجال المسلط وبهذا يحدث انخفاض في قيمة الاستقطابية ويقع هذا التردد في المنطقة تحت الحمراء وعندما لايبقى سوى تأثير الاستقطابية الالكترونية α_e – في هذه الحالة تكون قيمة العازل النسبي مساوية لـ n^2 حيث n معامل الانكسار – والتي تقل قيمتها هي الاخرى عند تجاوز حدود الترددات فوق البنفسجية .

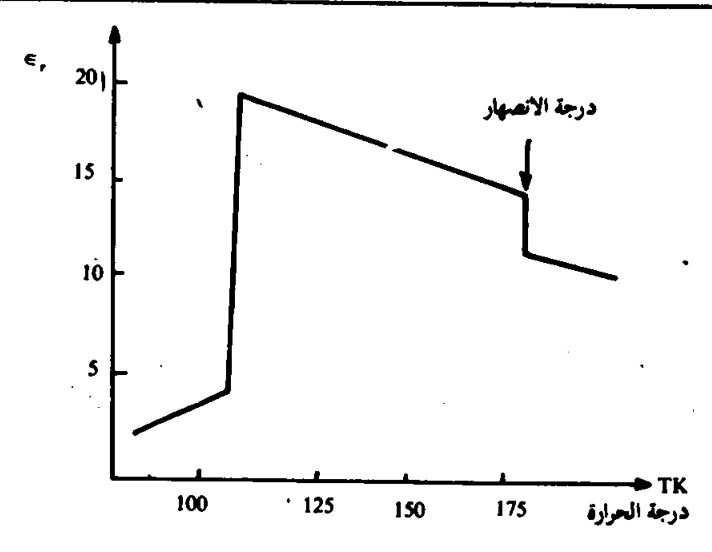


الشكل 17 - 8)تغير الاستقطابية مع التردد

c . مواد قطبية Polarmaterials

تمتلك هذه المواد عزوم ثنائيات قطبية دائمية وتكون هذه الثنائيات موزعة بصورة عشوائية بحيث أن محصلة العزوم النهائية – محصلة العزوم لوحدة الحجوم اي الاستقطاب تساوي صفراً في حالة غياب المجال الكهربائي . اما في حالة تسليط المجال فان هذه الجزئيات تميل للدوران استجابة للمجال ولكن في المواد الصلبة لاتمتلك الجزيئات نفس الحرية التي تحظى بها الجزيئات في المواد السائلة أو الغازية والحقيقة ان استجابة الجزيئات للدوران . يعتمد على نوع المادة الصلبة أي على نوع التفاعل بين الجزيئات نفسها وكذلك درجة الحرارة وشدة المجال المسلط ومن ثم فانه لاتوجد نظرية لربط P_0 مع شدة المجال المسلط

يبين الشكل (18 - 8) تغير ϵ_r مع درجة الحرارة لمادة كبريتيد الهيدروجين وهو يشكل حالة نموذجية لتغير ϵ_r مع T لمعظم المواد الصلبة . في حالة كبرتيد الهدروجين تكون درجة الانصهار لهذه المادة هي 188 كيلفن ويبين الشكل اعلاه ان ثابت العازل يستمر في الزيادة عند خفض درجة الحرارة وان هذه الزيادة تستمر حتى درجة الحرارة 103 كيلفن عندها تهبط قيمة ϵ_r بصورة حادة من القيمة 20 الى القيمة 3 ثم تستمر عليها مما يشير هنا الى أن الجزيئات تبدو وكانها قد تجمدت في اماكنـها .



الشكل (18 - 8) تغير ثابت العازل للمواد الصلبة مع درجة الحرارة

من جهة أخرى وعند ارتفاع درجة الحرارة الى الحد الذي تتحول فيه المادة الصلبة الى سائلة فان ϵ_r تقل كذلك مع ازدياد درجة الحرارة . في هذه الحالة تمتلك الجزيئات حرية أكبر في الحركة مما يجعل تراصفها باتجاه واحد (اتجاه المجال الكهربائي المسلط) صعبا وبالتالي تقل ϵ_r كلما ازدادت درجة الحرارة .

10 - 8 الخواص الكهربائية للعوازل مع المجالات المتناوبة : —

a ـ ثابت العازل المركب

لابد ان القارىء قد ادرك الان ان الجهد المسلط والذي مر ذكره في البنود السابقة كان من نوع الجهد المستمر (d.c) عندما يكون الجهد المسلط على المتسعة جهداً متناوباً ($V = V_0 e^{j\omega t}$) ، حيث أن $\omega = 2\pi f$ تمثل التردد الزاوي . فأن تياراً متناوبا سوف يسري في المتسعة وتكون قيمتة تبعا لقانون أوم . مساوية الى :

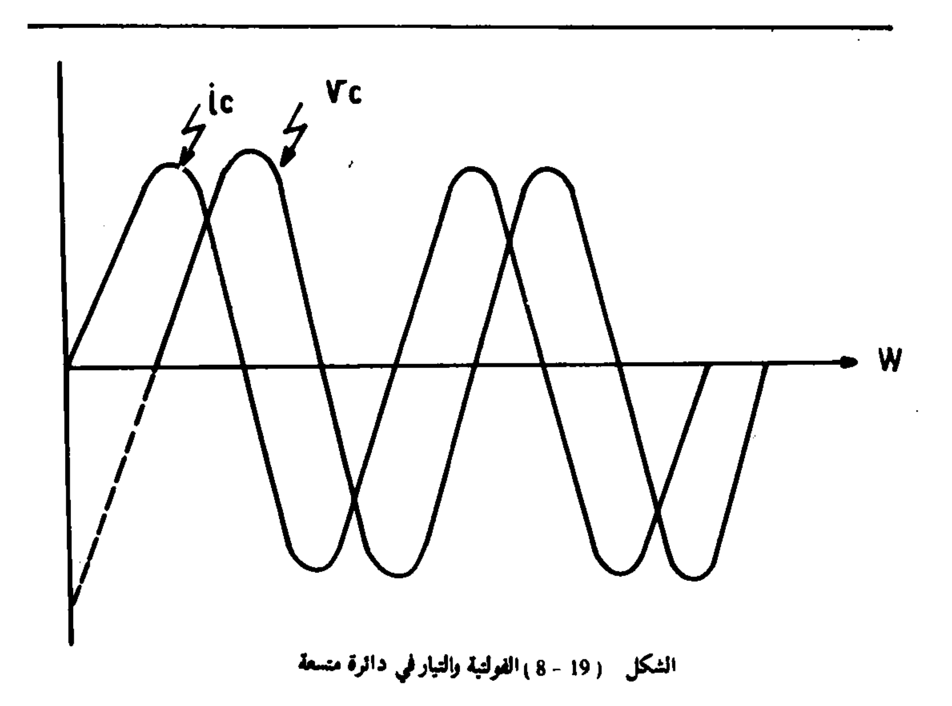
$$i = V/X_c \quad \ldots (8 - 70)$$

حيث تمثل X_c ممانعة المتسعة وتساوي $\frac{1}{j\omega c}$ وعند التعويض عن قيمة C نحصل على:

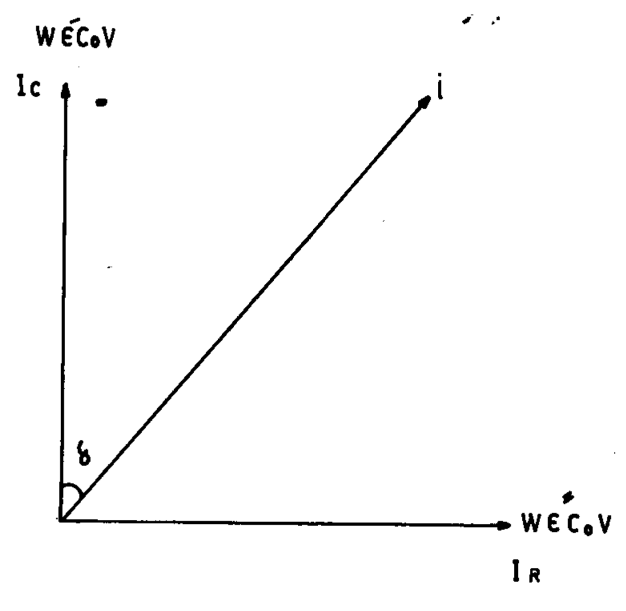
$$i = j\omega \epsilon_r C_0 \qquad \ldots (8-71)$$

أن ظهور الجذر الاصم $j = \sqrt{-1}$ في المعادلة اعلاه ، يشير الى أن هناك فرقاً في الطور ، بين الفولتية المسلطة على المتسعة والتيار المار فيها ، مقداره $90°$. ذلك هو ان التيار المار في المتسعة يتقدم الفولتية المسلطة عليها بزاوية طور مقدارها 90 انظر الشكل (19 - 8) . هذا صحيح فقط للمتسعات التي يكون الوسط العازل فيها هو الهواء. اما في المتسعات التي تحتوي على العوازل الاخرى. فان زاوية الطور ليست بالضبط 90 وانما اقل من $90°$ بزاوية صغيرة تدعى δ . هذا الاختلاف في زاوية الطور يعود الى أن جزءاً صغيرة من التيار الكلي سوف يكون بنفس الطور مع الفولتية المسلطة أي انه يمر في مقاومة ويمثلة الجزء I_R من التيار الكلي - انظر الشكل (20 - 8) .

أن التيار I_R أو تيار المقاومة غالباً ما يدعى بتيار التسرب وتشير قيمته الصغيرة جداً ($10^{-15} - 10^{-20}$ أمبير) الى ان العوازل موصلات ضعيفة جداً للتيار .



الشكل (19 - 8) الفولتية والتيار في دائرة متسعة



الشكل (20 - 8) زاوية الطور في المواد العازلة

على ضوء ما تقدم.يصبح بالامكان تمثيل المادة العازلة بدائرة كهربائية مكافئة تحتوي على متسعة ومقاومة مربوطتين على التوازي الشكل (21 - 8) . وللتعبير عن هذا التمثيل حسابيا سنجعل من ثابت العازل النسبي قيمة مركبة ، ذلك هو أن

$$\epsilon_r^* = \epsilon' - j\epsilon'' \qquad \dots (8 - 72)$$

حيث يمثل ϵ' مركبة ثابت العازل النسبي الخاص بالمتسعة بينما يمثل ϵ'' ألتسرب او الفقدان في التيار . وبالتعويض عن ϵ_r هذه في المعادلة 71 - 8 نجد ان

$$i = j\omega(\epsilon' - j\epsilon'')C_0V \qquad \dots (8 - 73)$$

وعند كتابة التيار الكلي بدلالة مركبتيه ، ذلك هو ان

$$i = I_R + iI_c \qquad \dots (8 - 74)$$

وعند المساواة نحصل على

$$I_R = \omega\epsilon''C_0V$$
$$I_C = \omega\epsilon\ C_0V \qquad \dots (8 - 75)$$

وبهذا فان عامل الفقدان الذي يمثله ظل الزاوية δ سوف يكون

$$\tan\delta = \epsilon'' / \epsilon' \quad \ldots (8-76)$$

وتتراوح قيمة عامل الفقدان هذا ما بين 10^{-5} للعوازل الجيدة الى 0.1 للعوازل الرديئة

من الشكل (21 - 8) ومن المعادلة (75 - 8) يتبين لنا ان

$$I_R + jI_C = j\omega CV + \frac{V}{R} \quad \ldots (8-77)$$

او ان

$$R = \frac{d}{\omega\epsilon_0\epsilon'' A} \quad \ldots (8-78)$$

$$C = \frac{\epsilon_0\epsilon' A}{d} \quad \ldots (8-79)$$

ان تمثيل المتسعة العملية بمقاومة ومتسعة ووجود تيار بطور الجهد نفسه يعني ان المتسعة تبدد قدره(Power)قدرها(VI_R)او ($I_R^2 R$)وكلما اقتربت المتسعة من الحالة المثالية تضاءلت القدرة المفقدة حيث تقترب ϵ'' من الصفر وكذلك الزاوية δ .

كذلك يمكن التعبير عن الخاصية التي تتناول القدرة المفقودة في العازل بدلالة التوصلية ذلك ان

$$R = \frac{1}{\sigma} \cdot \frac{d}{A} \quad \ldots (8-80)$$

حيث ان

$$\sigma = \omega\epsilon_0\epsilon'' \quad \ldots (8-81)$$

ومن الجدير بالذكر ان التوصلية المذكورة اعلاه لاتمثل خاصية التوصيل التي تتصف بها المواد ، اي مدى قدرة هذه المواد على توصيل التيار الكهربائي وانما هي مقياس للقدرة المفقودة عند تسليط مجال متناوب عبر العازل اي مقياس لكمية الحرارة التي تتولد نتيجة للاحتكاك بين الثنائيات بسبب الاصطدامات وبين الجزيئات الاخرى في المادة العازلة . ان هذا يعني ان بعض الطاقة سوف يتم

امتصاصها من المجال وعليه فاننا نجد ان σ تعتمد على التردد للمجال المسلط وبصورة عامة فان التوصلية تكون على نوعين التوصلية المستمرة $\sigma_{d.c}$ والمتناوبة او ان

$$\sigma = \sigma_{a.c} + \sigma_{d.c} \qquad \dots (8-82)$$

حيث تمثل $\sigma_{d.c}$ توصلية المادة للتيار المستمر وتكون واطئة جدا في التيار بينما تشير $\sigma_{a.c}$ الى مقدار الفقد في العازل عند وقوع المواد العازلة تحت تأثير مجال متناوب .

مرة اخرى يتبين ان ϵ_r هي كمية غير حقيقية لكنها كمية مركبة :- تمتلك جزءاً حقيقياً يمثل ϵ_r وهو مقياس للسعة والاستقطاب وجزءاً خيالياً ϵ''_r وهو مقياس للفقد في العوازل .

مما تقدم يتضح ان سلوك العوازل مع لمجالات المتناوبه هو أكثر تعقيداً ويؤدي وقوع هذه المواد تحت مثل هذه المجالات الى حدوث الفقدان في الطاقة (امتصاص من قبل العازل من المجال) وللتعرف على تأثير المجال المتناوب على العوازل فانه من المناسب التعرف اولا على الاستقطابيات الثلاث :- الالكترونية والايونية والاتجاهية المتناوبة.

a- الاستقطابية الالكترونية المتناوبة : -

دعنا نأخذ النموذج الذري الذي تعاملنا معه - الشكل (12 - 8) عند حسابنا للاستقطابية الالكترونية الساكنة .

لنفرض أن النواة تحتوي على شحنة موجبة e + بدلاً من Ze - وان الالكترون يمثل قيمة من الشحنة e - موزعة بالتساوي على حجم كرة نصف قطرها R . في حالة غياب المجال الكهربائي - وكما ذكرنا - يكون مركز الشحنات الموجبة e + منطبقاً على مركز الشحنات السالبة e - وبذلك فان الاستقطابية تكون معدومة .

لنفرض ايضاً أن القيمة الالكترونية تتحرك بالاتجاه المعاكس للمجال (تعتبر النواة ثقلية بالنسبة للالكترون ومن ثم فانه يمكن اعتبارها ساكنة وان الحركة الناتجة عند تسليط مجال متناوب هي حركة الشحنة الغيمية للالكترون) وتنزاح بمقدار x بدلا من d في الشكل (13 - 8) عن موقعها الاصلي في حالة غياب المجال الكهربائي $x = 0$

واذا ازيل المجال فجأة فان القيمة الالكترونية سوف تبدأ بالحركة متجهة نحو المركـز $x = 0$ بتعجيل $\frac{d^2x}{dt^2}$ يمكن حسابه من المعادلة التفاضلية :

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = - \frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^3} \qquad ...(8-83)$$

حيث تمثل m كتلة الغيمة الالكترونية و $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}$ قوة كولوم.
المعادلة (83 - 8) يمكن اعادة كتابتها بالصيغة

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = - ax \qquad ...(8-84)$$

والتي تمثل معادلة متذبذ توافقي بسيط حيث أن $a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}$، وان حلها يأخذ الصيغة : -

$$x = A\sin(\omega_0 t + k) \qquad ...(8-85)$$

حيث يمثل k,A ثابتا التكامل و $\omega_0 = (\frac{a}{m})^{1/2}$ يمثل تردد الرنين والذي يقع عند الترددات فوق البنفسجية من طيف الاشعة الكهرومغناطيسية .

تشير المعادلة (84 - 8) الى أن الالكترون يمكن أن يستمر بالتذبذب الى مالانهاية ذلـك ان هذه المعادلة لم تأخذ في الإعتبار ان الالكترون جسيم مشحون ومعجل وان بامكانه اشعاع الطاقة وبالتالي فانه يتوجب ادخال حد أخر الى المعادلة (84 - 8) يكافيء الفقـدان في الطاقة ويمثل قوة التوهين (damping force) على الالكترون وبهذا فان المعادلة (84 - 8) تتحول الى الصيغة : -

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = ax - 2b \frac{dx}{dt} \qquad ...(8-86)$$

حيث تمثل $2b \frac{dx}{dt}$ قوة التوهين و $2b$ ثابت التوهين ويكون مساوياً لـ

$$2b = \frac{\mu_0 e^2 \omega_0^2}{6\pi mc} \qquad ...(8-87)$$

حيث تمثل μ_0 ثابت النفاذية للهواء و c سرعة الضوء .

وفي حالة تسليط مجال كهربائي متناوب (E) بحيث أن

$$E = E_0 \cos \omega t = Re (E_0 e^{j\omega t}) \quad \ldots (8-88)$$

وان Re يمثل الجزء الحقيقي من هذا المجال ، فان هذا المجال سوف يؤدي الى تسليط قوة اضافية على الالكترون مقدارها $eE\cos\omega t$ – وان المعادلة (86 - 8) سوف تأخذ الصيغة : –

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -ax - b\frac{dx}{dt} - eE_0 \cos \omega t \quad \ldots (8-89)$$

دعنا نفرض أن حل المعادلة (89 - 8) بأخذ الصيغة :

$$x(t) = Re (A^* e^{j\omega t}) \quad \ldots (8-90)$$

حيث تمثل A^* سعة التذبذب المركبة .

عند التعويض عن قيمة$x(t)$من المعادلة (90 - 8) في المعادلة (89 - 8) سوف نحصل على :

$$Re \left\{ -\omega^2 A^* + \frac{q}{m} A^* + j\frac{2b\omega}{m} A^* + \frac{e}{m} E_0 \right\} e^{j\omega t} = 0$$

$$\ldots (8-91)$$

هذا صحيح في حالة كون

$$A^* = \frac{(e/m) E_0}{\omega^2 - \omega_0^2 - j\frac{2b\omega}{m}} \quad \ldots (8-92)$$

ان عزم الثنائي المحتث يكون دالة للزمن . أي أن

$$p(t) = -e\,x(t) \quad \ldots (8-93)$$

وعندالتعويض عن قيمة $x(t)$ من المعادلة (90 - 8) في المعادلة (93 - 8) نحصل على

$$p(t) = Re \left(\frac{e^2/m \quad E_0 e^{j\omega t}}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\frac{2b\omega}{m}} \right) \quad \ldots (8-94)$$

$$p(t) = Re (N \alpha_e^* E_0 e^{j\omega t}) = Re \{ \epsilon_0 (\epsilon_r^* - 1) E_0 e^{j\omega t} \} \quad \ldots (8-95)$$

وعند مساواة المعادلة (94 – 8) بالمعادلة (95 – 8) نحصل على

$$\epsilon_0 (\epsilon_r^* - 1) = \frac{N(e^2/m)}{\omega_0^2 - \omega^2 + j(2b\omega/m)} \quad \dots (8-96)$$

وكذلك فأن

$$\alpha_e^* = \frac{e^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2 + j(2b\omega/m)} \quad \dots (8\text{-}97A)$$

أو أن

$$\alpha_e' = \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)(e^2/m)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (4b^2\omega^2/m^2)} \quad \dots (8\text{-}97B)$$

وعند وضع $\omega = 0$ نحصل على :

$$\alpha_e' = \frac{e^2}{m\omega_0^2} \quad \dots (8-98)$$

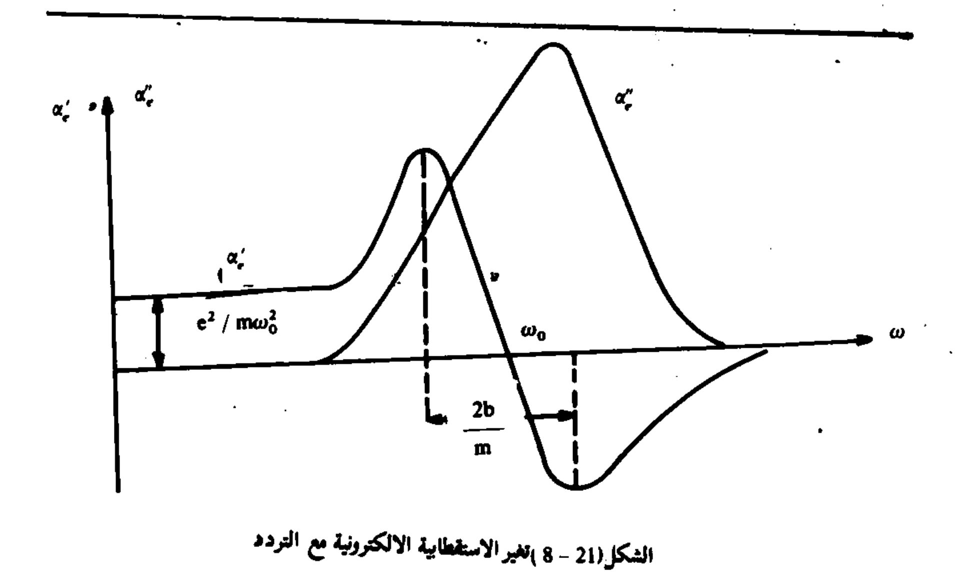
والتي تمثل قيمة الاستقطابية الالكترونية الساكنة – انظر المعادلة (50B – 8)

بالاضافة الى الجزء الحقيقي للاستقطابية الالكترونية (α_e') فان هناك الجزء الخيالي لهذه الاستقطابيه (α_e'') والتي يمكن الحصول عليها من المعادلة(96 - 8)وتساوي

$$\alpha_e'' = \frac{e^2}{m} \; \frac{(2b\omega/m)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (4b^2\omega^2/m^2)} \quad \dots (8-99)$$

يلاحظ في الشكل(21 – 8) الاستقطابية الالكترونية بجزئيها الحقيقي والخيالي كدالة للتردد .

بقي أن نذكر أخيراً أنه بالامكان الحصول على معادلة مشابهة للمعادلة (96 – 8) بالنسبة للاستقطابية الايونية



الشكل (21 - 8) تغير الاستقطابية الالكترونية مع التردد

b- الاستقطابية الدوارنية المتناوبة (الأسترخاء في العوازل) : -

تعتبر ظاهرة اعتماد الاستقطابية الدورانية على التردد ، من الظواهر المهمة عند دراسة الخواص الكهربائية للعوازل وذلك بسبب فقدان الطاقة الذي يحصل في هذه المواد العازلة في مدى كبير من الترددات يمتد من الصفر الى عدة الاف من الميكاهرتز.

ان الظاهرة الاساسية في المواد العازلة (الصلبة منها والسائلة) والتي تحتوي على عزوم ثنائيات قطبية دائمية عند تعرضها لمجال كهربائي متناوب هي الاسترخاء (relaxation) في هذه الثنائيات القطبية . ان ذلك يحدث كمايلي : -
افرض ان مجالا كهربائياً مستمرا (E) قد سلط على بلورة ما عند الزمن t = 0 ولفترة طويلة فان الثنائيات القطبية يمكن ان تسجيب لهذه المجال ، بطريقتين :

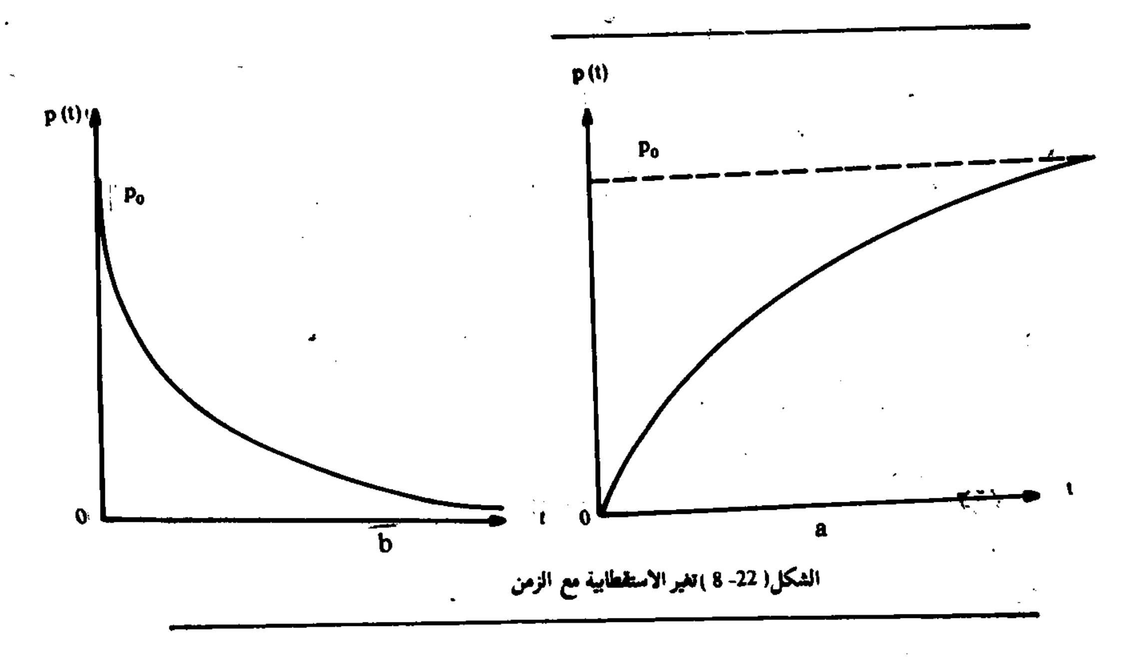
تميل بسرعة مع المجال ويعتمد زمن استقرارها في وضعها الاخير بعد ذلك ، على درجة الحرارة أو أنها تميل مع المجال ببطء ثم تصل الى وضعها الاخير بصورة تدريجية . في الحالة الثانية يكون هناك تاخير في الوصول الى القيمة النهائية للاستقطاب وبالتالي يحدث فرق طور بين المجال المسلط والاستقطاب الناتج عن هذا المجال .

افرض ان هناك N من الثنائيات القطبية في سائل ما وان لكل منها عزم ثنائي لوحدة الحجوم قدره P وان هذه الثنائيات كانت معرضة الى مجال كهربائي مستمر لفترة من الزمن كافية لكي تصل هذه الثنائيات الى حالة التوازن مع هذا المجال الكهربائي .

واذا ازيل هذا المجال فأن الاستقطاب سوف لن يختفي فجأة وانما يلزم الثنائيات القطبية بعض الوقت لتعود الى وضعها الاصلي قبل تسليط المجال بحيث أن .

$$P_0(t) = P_0 e^{-t/\tau} \qquad \dots (8-100)$$

حيث يمثل $P_0(t)$ مقدار الاستقطاب عند الزمن t بعد ازالة المجال الكهربائي و P_0 يمثل أقصى قيمة يصلها الاستقطاب عند تسليط المجال – انظر الشكل (8 – 22a) . اما τ فيدعى بزمن الاسترخاء وهو الزمن اللازم لوصول قيمة الاستقطاب الى $\frac{1}{e}$ من قيمته القصوى P_0 .



الشكل (22- 8) تغير الاستقطابية مع الزمن

أن معدل تغير الاستقطاب يكون مساوياً لـ

$$\frac{d}{dt} P_0(t) = -\frac{P_0}{\tau} e^{-t/\tau} = \frac{P_0(t)}{\tau} \qquad \dots (8-101)$$

أو أن

$$\frac{d}{dt} P_0(t) = \frac{1}{\tau} \{P_0(\infty) - P_0(t)\} \quad \dots (8-102)$$

حيث تمثل $P(\infty)$ القيمة النهائية للاستقطاب بعد زوال المجال الكهربائي عند الزمن $t=\infty$ وتكون قيمتها مساوية للصفر انظر الشكل (b 22 - 8) .

لدينا ان

$$P_0 = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) E \quad \dots (8-103)$$

وعلى فرض ان E مجال متناوب لذا فان المعادلة (102 - 8) ستؤول الى الصيغة

$$\frac{dP_0}{dt} = \frac{1}{\tau} \{\epsilon_0 (\epsilon_r - 1) E_0 \cos \omega t - P_0(t)\} \quad \dots (8-104)$$

كذلك فان المعادلة (103 - 8) ستؤول الى

$$P_0(t) = \epsilon_0 R_e \{(\epsilon_r^* - 1) E_0 e^{j\omega t}\} \quad \dots (8-105)$$

عند التعويض عن (105 - 8) في (104 - 8) سوف تحصل على

$$j\omega\epsilon_0 R_e (\epsilon_r^* - 1) E_0 e^{j\omega t}$$

$$= \frac{1}{\tau} R_e \{\{\epsilon_0 (\epsilon_r - 1) E_0 - \epsilon_0 (\epsilon_r^* - 1) E_0\} e^{j\omega t}\}$$

$$\dots (8-106)$$

ومنها تجد ان

$$\epsilon_r^* - 1 = \frac{\epsilon_r - 1}{1 + j\omega t} \quad \dots (8-107)$$

او ان

$$\epsilon_r^* - 1 = (\epsilon_r - 1) \left\{ \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2} - j \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\}$$

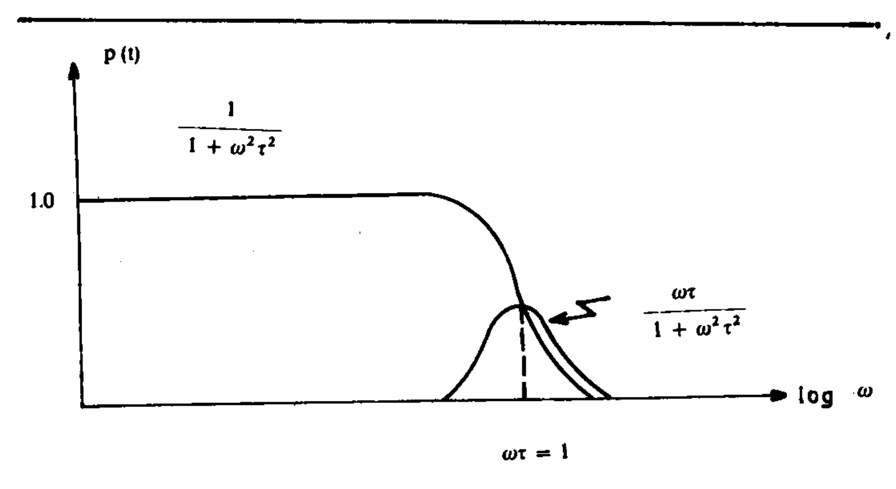
$$\dots (8-108)$$

وبهذا فان

$$P(t) = \frac{\epsilon_0 (\epsilon_r - 1)}{1 + \omega^2 \tau^2} E_0 \cos \omega t + \frac{\epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} E_0 \sin\omega t$$

$$\dots (8-109)$$

تكون مركبة الـ $\cos\omega t$ في نفس طور المجال الكهربائي بينما تتأخر مركبة الـ $\sin\omega t$ عنه بـ $90°$ ويبين الشكل (23 - 8) تغير المركبتين (الـ $\cos\omega t$ والـ $\sin\omega t$) مع لوغاريتم التردد



الشكل (23 - 8) تغير الاستقطابية مع التردد حسب نموذج دياي

يلاحظ من الشكل(23 - 8) ان المركبة الحقيقية تكون مساوية لـ1عند $\omega = 0$ بينما تكون المركبة الخيالية مساوية للصفر اما عند $\omega\tau = 1$ فان المركبة الحقيقية تصبح مساوية لـ $\frac{1}{2}$ وكذلك هي قيمة المركبة الخيالية . هذه القيمة ($\frac{1}{2}$)تمثل اقصى قيمة تصلها المركبة الخيالية . في هذه الحالة يحدث توافق بين تردد المجال المسلط وحركة الجزئيات (حالة الرنين) وبهذا فان امتصاص الطاقة من المجال يكون اكبر مايمكن بسبب من قدرة الثنائي القطبية على تتبع المجال في تغيره ومن ثم التعرض الى الاحتكاك مع الثنائيات الاخرى بسبب من التصادم بينهما . هذا يعني ان هناك نوعا من الامتصاص للطاقة من المجال ومن ثم يكون هناك فقدان في الطاقة يظهر على شكل حرارة وبالتالي فانها تؤدي الى رفع درجة حرارة المادة العازلة . انالفقدان في الطاقة يعطي معلومات مفيدة جداً عن طبيعة التفاعلات بين الجزئيات في المادة .

عند القيمة $\omega\tau > 1$ فان الثنائياتالقطبية سوف لن تكون قادرة على متابعة المجال في تغيره ومن ثم يقل الاستقطاب وكذلك قيمة الفقدان في الطاقة – انظر الشكل (23 - 8) .

11 - 8 معادلة دبياي وعملية الاسترخاء : –

ذكرنا انفاً ان فرق الطور الحادث بين المجال الكهربائي المسلط على المادة العازلة والاستقطاب الناتج فيها ، يرجع بالدرجة الاساس الى حصول تاخير في عملية الاستقطاب الذي يعود الى عدم قدرة الثنائيات القطبية من متابعة التغير السريع في المجال الكهربائي المسلط . اي حصول عملية استرخاء في ثابت العازل .

دعنا الان نضع ماجاء اعلاه بصيغة رياضية . اي ان

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon_\infty + \int_0^\infty a(t)\, e^{j\omega t}\, dt \qquad \ldots (8-110)$$

حيث تمثل ϵ_∞ قيمة ثابت العازل عند الترددات العالية جدا وتاخذ قيمة ثابتة تكون مساوية لـ n^2 حيث يمثل n معامل الانكسار للمادة اما $a(t)$ فيمثل عامل الاضمحلال في الاستقطاب بعد الزوال المفاجيء للمجال الكهربائي . لقد اقترح دبياي Debye ان عامل الاضمحلال هذا ياخذ الصيغة :

$$a(t) = a(0)\, e^{-t/\tau} \qquad \ldots (8-111)$$

وعند التعويض عن $a(t)$ من المعادلة (111 - 8) في المعادلة (110 - 8) نحصل على

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_\infty + \int_0^\infty a(0)\, e^{(j\omega - 1/\tau)t}\, dt \qquad \ldots (8-112)$$

بعد التكامل نحصل على

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{a(0)}{\frac{1}{\tau} - j(\omega)} \qquad \ldots (8-113)$$

عندما تكون $\omega = 0$ فان $\epsilon_s = \epsilon_r(\omega)$ وعليه فان

$$\epsilon_s = \epsilon_\infty + \tau\, a(0) \qquad \ldots (8-114)$$

او ان

$$a(0) = \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{\tau} \qquad \ldots (8-115)$$

عند التعويض عن قيمة $a(0)$ من المعادلة (115 - 8) في المعادلة (111 - 8) نحصل على

$$a(t) = \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{\tau}\, e^{-t/\tau} \qquad \ldots (8-116)$$

ومن ثم فان المعادلة (112 - 8) تاخذ الصيغة

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_\alpha + \int_0^\alpha \frac{\epsilon_s - \epsilon_\alpha}{\tau} e^{-t/\tau} e^{j\omega t} dt \qquad \ldots (8-117)$$

وبعد اجراء التكامل نحصل على

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_\alpha + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\alpha}{1 - j\omega\tau} \qquad \ldots (8-118)$$

ومن المعلوم ان :

$$\epsilon_r^*(\omega) = \epsilon_r' - j\epsilon_r'' \qquad \ldots (8-119)$$

وبهذا فان

$$\epsilon_r' = \epsilon_\alpha + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\alpha}{1 + \omega^2\tau^2} \qquad \ldots (8-120)$$

و

$$\epsilon_r'' = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\alpha)\,\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2} \qquad \ldots (8-121)$$

المعادلتان (120) و (121) تدعى بمعادلتي ديباي (Debye equations) وان رسم $\epsilon_r', \epsilon_r''$ كدالة لـ ω سوف يبدوان كما في الشكل (21 - 8) .

12 - 8 الفقدان في العوازل

رابنا فيما سبق ان الاستقطابيات الثلاث : الالكترونية والايونية والدورانية تقود الى ثابت عازل مركب عند تعرض المادة العازلة – التي تظهر فيها هذه الاستقطابيات – الى مجال كهربائي متناوب . اي ان

$$\epsilon_r^* = \epsilon_r' - j\epsilon_r'' \qquad \ldots (8-119)$$

كذلك وجدنا ان ϵ_r'' هو مقياس لفقدان الطاقة اي ان ظهوره في المعادلة (119 - 8) يشير الى حصول امتصاص للطاقة من قبل الجزيئات . من المجال الكهربائي المسلط وللتدليل على ذلك سناخذ هذا المثال التالي :

خذ متسعة ذات صفيحتين متوازيتين يفصل بينهما وسط عازل ثابت عزله يساوي ϵ_r^* بحيث ان الجزء الحقيقي من هذا الثابت هو ϵ_r' والجزء الخيالي منه هو ϵ_r'' . .

افرض ايضا ان المجال المسلط هو $E_0 \cos\omega t$ وان الشحنة المتولدة لوحدة السطوح عند الزمن (t) هي (t) Q. لذا ان

$$J = \frac{dQ(t)}{dt} = \frac{dD(t)}{dt} \qquad \ldots (8-120)$$

حيث تمثل D(t) متجه الازاحة والذي يمثل الفيض الكهربائي لوحدة المساحات ذلك ان

$$D(t) = R_e \{\epsilon_0 \epsilon_r^* E_0 e^{j\omega t}\}$$

عند التعويض عن D (t) من المعادلة (121 - 8) في المعادلة (120 - 8) واجراء التفاضل نحصل على :

$$J(t) = \epsilon_0 E_0 R_e \{(j\omega(\epsilon_r' - j\epsilon_r'') e^{j\omega t}\} \qquad \ldots (8-122)$$

او ان

$$J(t) = \omega\epsilon_0\epsilon_r'' E_0 \cos\omega t - j\omega\epsilon_0\epsilon_r' \sin\omega t \qquad \ldots (8-123)$$

يلاحظ في المعادلة اعلاه ان الجزء الخيالي ϵ_r'' يحدد قيمة مركبة التيار التي هي في نفس طور المجال الكهربائي المسلط بينما يحدد ϵ_r' قيمة مركبة التيار التي تتقدم المجال الكهربائي بـ $90°$. ان القدرة الآنية الممتصة لكل متر مكعب بواسطة العازل ، يمكن حسابها من المعادلة

$$\omega(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} J(t) E(t) d(\omega t) \qquad \ldots (8-124)$$

وبهذا فان

$$\omega(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega\epsilon_0 E_0^2 (\epsilon_r'' \cos^2\omega t - \epsilon_r' \sin\omega t \cos\omega t)\, d(\omega t) \qquad (8-125)$$

او ان

$$\omega(t) = \frac{\omega}{2} \epsilon_0 \epsilon_r'' E_0^2 \qquad \ldots (8-126)$$

وبهذا نجد ان الطاقة الممتصة تتناسب مع ϵ_r'' وهذا ما يعرف بفقد العازل dielectric loss . ولعله من المناسب التذكير هنا انه عادة ما يشار الى الفقد عن طريق حساب ظل زاوية الفقد δ – راجع البند (10 - 8) حيث ذكرنا هناك ان

$$\tan\delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'} \qquad \ldots (8-76)$$

الاسئلة

8-1 طبقة من الالمنيوم بسمك مهمل وضعت بين صفيحتي متسعة كما في الشكل . ماهو تأثير ذلك على السعة اذا(a) الطبقة معزولة كهربائيا(b) اذا ربطت الصفيحة الى الصفيحة العليا من المتسعة .

AL

8-2 متسعة ربطت الى نضيدة ، ماذا يحدث a) – اذا ادخل عازل بين صفيحتيها مربوطة الى النضيدة b) عند قطعها عن البطارية . اشرح بالتفصيل .

8-3 متسعة ذات صفيحتين متوازيتين بمساحة A ومفصولة عن بعضهما بمسافة d مشحونة الى فرق جهد V . اذا فصلت البطارية ثم سحبت الصفيحتان باتجاهين متعاكسين الى مسافة 2d . اشتق العلاقة بدلالة V , d , A لـ (a) فرق الجهد الجديد(b) الطاقة الاولية والنهائية(c)الشغل اللازم لفصل الصفيحتين

8-4 متسعة ذا صفيحتان متوازيتان بمساحة $20\ cm^2$ ملئت بالمايكا($\epsilon_r = 6$)اذا كانت المسافة بين الصفيحتين هي 1cm وان المتسعة ربطت الى فرق جهد 100V فاحسب

a- سعة المتسعة b- الشحنات الحرة على الصفيحة

c- كثافة الشحنة السطحية بسبب الشحنات المستقطبة

d- المجال داخل المايكا

8-5 برهن على ان صفيحتي متسعة متوازية يمكن ان تجذب احداهما الاخرى بقوة تساوي

$$F = \frac{q^2}{2\epsilon_0 A}$$

حيث تمثل A مسافة الصفيحة

8-6 برهن على ان ثابت العازل للموصل يمكن اعتباره مساويا الى اللانهاية

8-7 غاز اركون يحتوي على 2.7×10^{25} ذرة / $م^3$ عند $0^\circ C$ – احسب ثابت العازل لهذا الاركون اذا كان قطر ذرة الاركون هو 3.84 انكستروم

8 - 8 افرض ان الاستقطابية لذرة Kr تساوي $2.18 \times 10^{-4}\ F - m^2$. احسب ثابت العازل لـ Kr عند $0°C$.

8 - 9 ما هو عزم الثنائي القطبية لجزيئة NaCl في البخار ؟ افرض ان الجزيئة تتكون من ايوني Na^+ , Cl^- مفصولة عن بعضهما بمسافة 25 انكستروم

8 - 10 احسب عزم ثنائي القطبية لشحنتين كل منهما 1.5 مايكروكولوم وتقع عند النقاط (0, 5) , (5, 0)، خذ المسافة بالسنتيمترات

8 - 11 برهن على ان الجزيئة عندما تستقطب بواسطة المجال ε فان الطاقة الكامنة سوف تخزن فيها وان مقدار هذه الطاقة هو $\frac{1}{2}\ \alpha\varepsilon^2$

8 - 12 برهن على ان الطاقة الكامنة للثنائي القطبية في المجال ε هي $V = - P\varepsilon \cos\theta$ حيث θ الزاوية بين الثنائي والمجال .

8 - 13 برهن على ان العزم الزاوي τ لثنائي قطب في مجال منتظم ε هو

$$\tau = p x \varepsilon$$

8 - 14 اذا كان ثابت العازل المستمر لـ NH_3 عند درجتي الحرارة $0°C$ و $100°C$ هما 8.34 و 4.87 وعلى التوالي . احسب عزم الثنائي القطبية الدائمي لهذه المادة (افرض ان عدد الجزيئات 2.7×10^{25} لكل متر مكعب) .

8 - 15 الاستقطابية المولية للماء تزداد من 4×10^{-5} الى 6.8×10^{-5} لكل م³ عندما تقل درجة الحرارة من $500°K$ الى $300°K$. احسب العزم الدائمي لجزيئة الماء

8 - 16 اذا كان ثابت العازل لغاز عند درجة حرارة $27°C$ هو $\epsilon_r = 1.006715$ وعند درجة حرارة $177°C$ هو $\epsilon_r = 1.005970$ وكان عدد الجزيئات في هذا الغاز هو 2.5×10^{25} لكل متر مكعب . احسب عزم الثنائي القطبية لهذه الجزيئة ومجموع الاستقطابيتان الالكترونية والايونية

8 - 17 جزيئة غاز ثنائي القطبية تمتلك عزم دائمي 1.2 Debye . ما هي قيمة المجال الذي يجب تسليطه ليسبب استقطابية دورانية قدرها 50 % من قيمة الاشباع عند $27°C$.

8-18 اذا كان ثابت العازل للماء هو 81 ومعامل انكساره 1.33 . مانسبة المساهمة التي تعطيها الاستقطابية الايونية الى الاستقطابية الكلية.

8-19 اذا كانت الاستقطابية لذرة هي $10^{-40}\ F - m^2$. فاحسب (a) عزم الثنائي القطبية المحتث في الذرة عن وضعها على بعد 10 انكستروم من الكترون . (b) هل ان هناك من قوة بين الذرة والالكترون وباي قيمة وما هو اتجاهها .

8-20 اذا كان ثابت العازل النسبي للكبريت هو 3.75 عند درجة حرارة $27C^\circ$. افرض ان ثابت المجال المحلي $\gamma = \frac{1}{3}$ فاحسب الاستقطابية الالكترونية للكبريت علما بان كثافة الكبريت هي 2.05 غم / سم^3 وان الوزن الذري للكبريت هو 32 .

8-21 فسر فزيائيا لماذا تكون الايونية الاستقطابية غير حساسة للتغير في درجة الحرارة هل تتوقع زيادة ام نقصان الاستقطابية الكلية مع زيادة درجة الحرارة ؟ وضح بالتفصيل

8-22 لذرة نموذجية اعط تقديراً لقيمة المجال اللازم لازاحة النوية مسافة تساوي 1% من نصف قطرها .

8-23 ما هو المجال اللازم لتدوير 1% من الثنائيات القطبية في مادة صلبة ثنائية القطبية عند درجة الحرارة الاعتيادية اذا كان $\mu = 1$ Debye

8-24 اعط فكرة مختصرة عن المجال المحلي . ما هي اهميته بالنسبة للمواد العازلة ؟

8-25 برهن على ان المجال الناتج من عمل فجوة دائرية في عازل يعطى بواسطة

$$E = \left(\frac{3\epsilon}{1 + 2\epsilon} \right) E_0$$

حيث يمثل ϵ ثابت العازل و E_0 المجال الخارجي

8-26 برهن على ان المجال ε_3 العائد الى الثنائيات الواقعة في داخل فجوة كروية ينعدم في البلورة المكعبة .

8-27 افرض ان فجوة لورنتز قد اخذت على اساس انها مكعبة . احسب المجال ϵ_2 العائد الى الشحنات الواقعة على سطح هذه الفجوة . .

8-28 المجال ϵ_3 يعتمد على التناظر الموجود في البلورة وعادة ما يكون مساويا لقيمة غير الصفر في البلورات غير المكعبة . افرض ان هذا المجال ياخذ الصيغة

$$\varepsilon_3 = \left(\frac{b}{\epsilon_0} \right)$$

حيث b هو ثابت . احسب ثابت العازل لهذه المادة

8-29 ما هي الاستقطابية الانية ؟ وما هي شروط حدوثها ؟

8-30 اشرح ظاهرة اعتماد الاستقطابية على التردد . وضح مع الرسومات

8-31 ما هو المقصود بزاوية الفقد في العوازل ؟ تكلم عن اهميتها بالنسبة للمواد العازلة .

8-32 في المعالجة الكلاسيكية للاستقطابية الالكترونية المتناوبة تم اعتبار القوة الاسترجاعية على اساس انها ذات صفة توافقية على الرغم من حقيقة ان القوة الموجودة هي من نوع قوة كولومية والتي هي مختلفة تماما عن الاولى . كيف تفسر ذلك ؟ اعط علاقة رياضية لحساب التردد الطبيعي ω_0 بدلالة خواص الذرة

8-33 احسب $\epsilon''(\omega), \epsilon'(\omega)$ لماء عند درجة حرارة الغرفة

8-34 لدينا ان $\tan\delta = \frac{\epsilon''}{\epsilon'}$ برهن على ان

a
$$D = \epsilon_0 (\epsilon_r'^2 + \epsilon_r''^2)^{1/2} e^{i\delta} \varepsilon$$

b
$$Q = \frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r' \omega \tan\delta \varepsilon^2$$

حيث Q الطاقة الممتصة

c – احسب زاوية الفقد كدالة للتردد ثم ارسمها .

8-35 ماذا تفهم عن عملية الاسترخاء في العوازل ؟ وضح بالتفصيل

الفصل التاسع

الخواص المغناطيسية للمواد الصلبة

1 - 9 المقدمة

ان دراسة الخواص المغناطيسية للمواد تعد محاولة ذات اهمية بالغة في معرفة تركيب المواد الصلبة المعدنية وغير المعدنية . ولكن وفي حالات كثيرة لا توجد نظرية متكاملة تساعد في تفسير سلوك بعض الخواص المغناطيسية وذلك لصعوبة المتطلبات الرياضية لتلك النظرية وكذلك لصعوبة اجراء تجارب عملية دقيقة ذات نتائج مقبولة لمعرفة مدى تطابق النتائج العملية والنظرية للتاكد من صحة النظريات المستخدمة . هناك طريقتان لتصنيف المواد المغناطيسية :

الاولى : تصنف على اساس العلاقة التي تربط بين الخواص المغناطيسية للمادة وخواصها الالكترونية والطريقة الثانية تصنف المواد المغناطيسية اعتمادا على خواص الحجيرات المغناطيسية (magnetic domains) لتلك المواد .

ان المواد المغناطيسية تدخل في صناعة اغلب الدوائر الكهربائية والالكترونية ويمكن تصنيفها حسب طبيعة المادة المغناطيسية الى

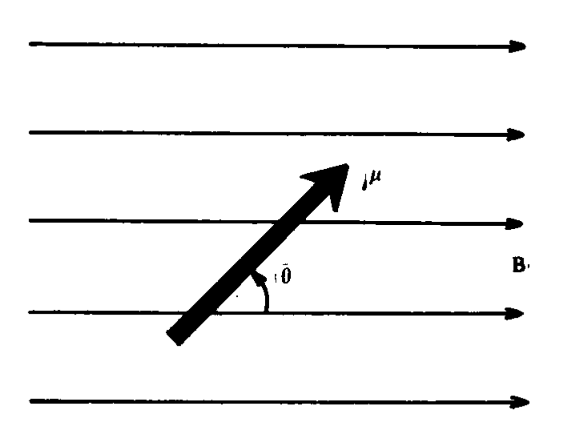
1- مواد مصنوعة من مغناطيس مطاوع (soft magnet) وتمتاز هذه المواد بنفاذية مغناطيسية عالية وقوة قهرية (corecive) واطئة وتدخل في صناعة المحولات والمكائن وفي اجهزة الحاسبات الالكترونية لخزن المعلومـــات

2- مواد مصنوعة من مغناطيس صلد (hard magnet) وان هذه المواد تمتاز بنفاذية مغناطيسية عالية وقوة قهرية عالية ايضا ويصعب ازالة مغناطيسيتها و تستخدم هذه المواد في اجهزة الراديو والتلفزيون وناقلات الطـــاقـــة (transducers) .

2 - 9 اصل الظاهرة المغناطيسية

اذا وضع ثنائي قطب مغناطيسي (magnetic dipole) في مجال مغناطيسي شدة فيضه تساوي (B) فانه يمتلك طاقة كامنة (V) تعتمد على قيمة العزم المغناطيسي (μ) واتجاهه بالنسبة للمجال (الشكل 1 - 9) . ان العزم $\vec{\tau}$ المسلط على ثنائي قطب مغناطيسي موجود في مجال مغناطيسي شدة فيضه $\vec{B}$ هــــو

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \qquad ..(9-1)$$



الشكل (1 - 9) ثنائي قطب مغناطيسي ذي عزم μ بأتجاه يصنع زاوية θ بالنسبة لمجال مغناطيسي B خارجي

ان العزم المسلط يكون ذا قيمة عظمى عندما يكون ثنائي القطب عموديا على المجال ويساوي صفرا عندما يكون موازيا او معاكسا للمجال . ولكي نحسب الطاقة الكامنة V ، علينا اولاً ان نحدد اتجاها مناسبا نعتبر عنده V تساوي صفرا . ولما كان التغير بالطاقة الكامنة يمكن قياسه عمليا . لذلك فان مرجع الطاقة اختياري تماما ومن المناسب ان نجعل $V = 0$ عندما $\theta = 90^\circ$ (حيث θ تمثل الزاوية بين μ, B) ، اي عندما تكون μ عمودية على B . ان الطاقة الكامنة عند اتجاهات اخرى لـ μ تساوي الشغل اللازم لتدوير ثنائي القطب من $\theta = 90^\circ$ الى الزاوية θ التي تحدد تلك الاتجاهات وعليه :

$$V = \int_{90}^{\theta} \tau d\theta$$

$$= \mu B \int_{90}^{\theta} \sin\theta d\theta$$

$$V = -\mu B \cos\theta$$

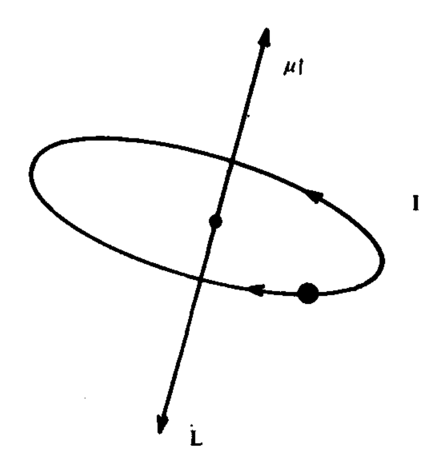
ان اصغر قيمة للطاقة الكامنة تساوي $-\mu B$ عندما μ تشير الى نفس اتجاه B وان اكبر قيمة للطاقة الكامنة تحدث عند الزاوية $\theta = \pi$ حيث عندها يكون اتجاه μ معاكسا لاتجاه المجال .

هنا تم تعريف ثنائي القطب المغناطيسي بدلالة الشحنات المغناطيسية ، وهذا لا ينطبق مع الواقع العملي حيث لم تفلح جميع التجارب التي اجريت للبرهنة على وجود الشحنات المغناطيسية . ان اصل الخواص المغناطيسية ينشأ من حركة الشحنات الكهربائية ، اي حركة الالكترونات . ان العزم المغناطيسي لحلقة يمر فيها تيار I هو :

$$\mu = IA \qquad \ldots (9-3)$$

حيث I قيمة التيار و A المساحة المحصورة داخل الحلقة (لاحظ الشكل 2 - 9) ان الالكترون الذي يدور بعدد ν من الدورات لكل ثانية في مدار دائري نصف قطره r يولد تيارا ومقداره $-e\nu$ (لاحظ ان شحنة الالكترون سالبة) .ولذلك فان العزم المغناطيسي المتولد هو :

$$\mu = IA = -e\nu\pi r^2 \qquad \ldots (9-4)$$



الشكل(2 - 9)عزم ثنائي قطب مغناطيسي لحلقة يمرفيها تيارا I . إن L تمثل الزخم الزاوي للالكترون الذي يولد التيار .

ولكن السرعة الخطيه v للالكترون هي $2\pi\nu r$ ، وعليه فان الزخم الزاوي (angular momentam) للالكترون يكون

$$L = mvr$$
$$= 2\pi m\nu r^2 \qquad \ldots(9-5)$$

بمقارنة المعادلتين (4 - 9) , (5 - 9) نجد ان العزم المغناطيسي للالكترون تساوي

$$\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)L \qquad \ldots(9-6)$$

التي تصف الحركة الدورانية للالكترون . ان المقدار ($-e/2m$) والذي يتضمن شحنة وكتلة الالكترون يدعى بنسبة العزم المغناطيسي الى الزخم الزاوي او النسبة الجايرومترية (gyromagnetic ratio) والاشارة السالبة تعني ان اتجاه μ عكس اتجاه L . ان الزخم الزاوي L مكمم بوحدات $h/2\pi$ ، حيث h ثابت بلانك . وعليه فان القيمة الدنيا لـ μ هي

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m} \qquad \ldots(9-7)$$

وتدعى الكمية $\frac{eh}{4\pi m}$ بمغنيط بور (Bohr magneton) وقيمتها تساوي 9.27×10^{-24} جـــول / تسلا وان واحـــد تســـلا يســـاوي 10^4 كاوس (1 Tesla $= 10^4$ gauss). لابد من الاشارة هنا بان الالكترون يمتلك زخما زاويا ذاتيا نأتجا عن حركته حول محوره بالاضافة الى زخمة الزاوي المداري ، ويرافق الزخم الزاوي الذاتي عزما مغناطيسياً معيناً . ان نسبة العزم المغناطيسي الى الزخم الزاوي الناشيء من برم الالكترون يساوي ضعف القيمة التابعة للحركة المدارية للالكترون . وعليه فان العزم المغناطيسي البرمي (spin magnetic moment) يرتبط بالزخم الزاوي البرمي S بالعلاقة :

$$\mu = -\frac{e}{m} S \qquad \dots (9-8)$$

3 - 9 تصنف المواد المغناطيسية

يمكن وصف المجال المغناطيسي بواسطة متجه شدة الفيض المغناطيسي $\vec{B}$ (magnetic flux) أو بواسطه متجه سده المجال المغناطيسي $\vec{H}$ (magnetic field intensity) وان العلاقة التي تربط بينهما في الفراغ هي :

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \qquad \dots (9-9)$$

حيث μ_0 النفاذية المغناطيسية للفراغ وقيمتها تساوي $4\pi \times 10^{-7}$ هيرتز/متر . وعندما نضع مادة في مجال مغناطيسي فانها تتمغنط وتمغنط هذه المادة يمكن وصفه بمتجه التمغنط $\vec{M}$. وعليه فان الحث المغناطيسي يصبح

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \mu_0 \vec{M} \qquad \dots (9-10)$$

اي ان الحث المغناطيسي يتكون من جزئين ، الاول $\mu_0 \vec{H}$ يتولد من مصدر خارجي والثاني $\mu_0 M$ ينتج عن تمغنط المادة او الوسط . لقد لوحظ ان التمغنط يتناسب طردياً مع المجال الممغنط لكثير من المواد وحسب المعادلة

$$\vec{M} = \chi \vec{H} \qquad \dots (9-11)$$

حيث χ تسمى بالقابلية المغناطيسية للمادة او التاثرية المغناطيسية (magnetic susceptibility) . ومن المعادلة (11 - 9) يتضح لنا ان χ بدون وحدات وذلك لان $\vec{M}$ لها نفس وحدات شدة المجال المغناطيسي $\vec{H}$. ان قابلية المادة للتمغنط χ ما هي الا تعبير عن استجابة الوسط المادي للتأثر بالمجال المغناطيسي الخارجي وهي بذلك ترتبط ارتباطاً وثيقا بخواصُ ذرات وجزيئات الوسط .

وبالتعويض عن $\vec{M}$ من المعادلة (11 - 9) في المعادلة (10 - 9) نحصل على

$$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi) \vec{H} \qquad \dots (9 - 12)$$

من المعادلة (12 - 9) يمكننا ايضا تعريف خاصية اخرى نطلق عليها بالنفاذية المغناطيسية للمادة (permeability) ونرمز لها بـ μ ، اي

$$\mu = \mu_0 (1 + \chi) \qquad \dots (9 - 13)$$

وتاخذ نفس وحدات نفاذية الفراغ μ_0 . يمكن اعادة كتابة المعادلة(12 - 9)لتصبح

$$B = \mu H \qquad \dots (9 - 14)$$

ان النسبة بين النفاذية المغناطيسية للمادة والنفاذية المغناطيسية للفراغ تسمى بالنفاذية النسبية (relative permeability) μ_r وتساوي

$$\mu_r = 1 + \chi \qquad \dots (9 - 15)$$

ان النفاذية النسبية μ_r للمادة مشابهة لمعامل العزل الكهربائي للمواد العازلة . ان قيمة النفاذية النسبية للفراغ مساوية للواحد بينما تكون قيمتها بالنسبة للمواد البارامغناطيسية والفيرومغناطيسية اكثر من واحد في حين تكون قيمتها للمواد البارامغناطيسية اقل من واحد .وهكذا فان الخواص المغناطيسية للمادة يمكن ان تحدد كليا بمعرفة قيمة احد المقادير (μ_r, μ, χ) والسبب الوحيد لتعريف المقادير الثلاثة هو تبسيط صيغ بعض المعادلات الشائعة الاستعمال .

ان ظاهرة تمغنط المادة نتيجة لوقوعها تحت تاثير مجال مغناطيسي خارجي يعود الى سببين ، الاول هو التغير الذي يحدث في حركة الالكترونات في ذرات المادة والثاني هو انتظام الذرات والجزيئات التي تمتلك عزماً مغناطيسياً دائمياً .

ان المواد الدايامغناطيسية (diamagnetic) تمتلك تأثيرية مغناطيسية سالبة وان الظاهرة الدايامغناطيسية موجودة في جميع المواد دون استثناء ولكنها لا تظهر في كثير من المواد وذلك لوجود التأثرية البارامغناطيسية الموجبة والتي تحجب ظهور الدايامغناطيسية. كذلك فان الدايامغناطيسية لا تعتمد على درجات الحرارة وهي ناتجة عن تسليط مجال مغناطيسي خارجي يؤثر على حركة الالكترونات الداخلية للذرات . وغالباً ما تعتبر مدارات الالكترونات حول نوى الذرات على انها تيارات كهربائية ، فعندما نسلط مجالاً مغناطيسياً خارجياً فان المدارات الالكترونية تتغير وبذلك يتغير العزم المغناطيسي الناتج عن هذه التيارات . وهذا يعني وجود عزم مغناطيسي محتث . ان قانون لينز (Lenz's law) للحث الكهرومغناطيسي ينص على ان التيارات المحتثة بوجود المجال المغناطيسي تولد مجالاً مغناطيسياً معاكساً للمجال المغناطيسي الخارجي . وعليه فان المادة ككل سوف تكتسب تمغنطاً معاكساً لهذا المجال الخارجي فتضعفه وبذلك فان المواد الدايامغناطيسية تمتاز بكونها ذات قابلية مغناطيسية (χ) سالبة وهي اصغر بكثير من الواحد ($\chi << 1$) . ان الجدول (1 - 9) يوضح قيم التاثرية المغناطيسية $|\chi|$ لبعض العناصر .

الجدول (1 - 9) التأثرية المغناطيسية χ لبعض العناصر المختارة .

التأثرية المغناطيسية χ	نوع المادة
	بارامغناطيسية
$+ 2.2 \times 10^{-5}$	المنيوم (Al)
$+ 98 \times 10^{-5}$	منغنيز (Mn)
$+ 36 \times 10^{-5}$	تنكستن (W)
	دايامغناطيسية
$- 1.0 \times 10^{-5}$	نحاس (Cu)
$- 3.6 \times 10^{-5}$	ذهب (Au)
$- 3.2 \times 10^{-5}$	زئبق (Hg)
$- 9.0 \times 10^{-5}$	ماء H_2O
$- 0.2 \times 10^{-5}$	هيدروجين H

ان التاثرية المغناطيسية (χ) للمواد البارامغناطيسية (paramagnetic) تكون موجبة ومثال ذلك ايونات العناصر الانتقالية وايونات العناصر النادرة ، حيث المدارات الذرية الخارجية لها تكون غير مشبعة . ان ظهور البارامغناطيسية في المواد هو نتيجة امتلاك الكتروناتها عزوم مغناطيسية (سواء كانت ناشئة عن الحركة البرمية او الدورانية) . فعند تسليط مجال مغناطيسي خارجي يؤدي الى تراصف هذه العزوم باتجاه المجال وبذلك يؤدي الى تمغنط المادة . ان ارتفاع درجة حرارة المواد البارامغناطيسية يؤدي الى زيادة الاهتزازات الحرارية (thermal vibration) للذرات او الجزيئات المكونة لها وهذا يعيق تراصف عزومها وبذلك يؤدي الى نقصان تمغنط المادة . وبمعنى اخر ، فان التاثرية المغناطيسية للمواد .البارامغناطيسية تتناقص بارتفاع درجة حرارة المادة . اي

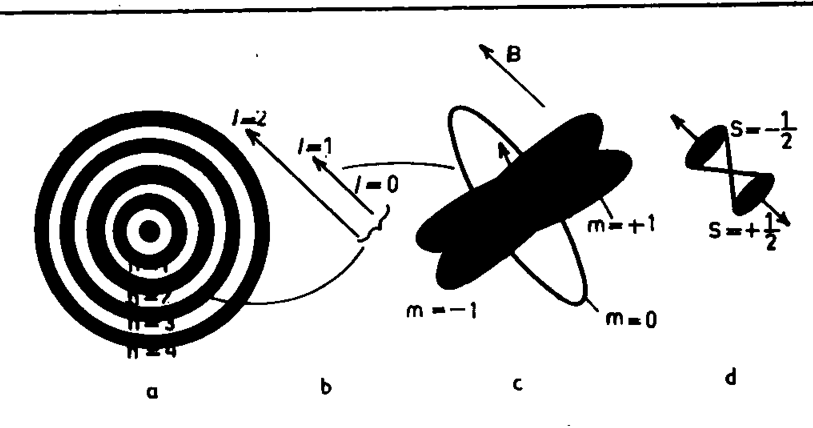
$$\chi = \frac{C}{T} \qquad \dots (9 - 16)$$

حيث T درجة الحرارة المطلقة و C كمية ثابتة تدعى ثابت كوري (Curie constant) وان العلاقة (16 – 9) تسمى بقانون كوري . .

إن العناصر الانتقالية مثل الحديد (Fe) والكوبلت (Co) والنيكل (Ni) وكذلك بعض العناصر النادرة مثل الكدولنيوم (Gd) تمتلك عزماً مغناطيسياً ذاتياً (spontaneous magnetic moment) في درجات الحرارة الواطئة دون تسليط مجال مغناطيسي خارجي وتسمى هذه الظاهرة بالفيرومغناطيسية (ferromagnetic). أن برم الالكترونات في هذه المواد يتراصف بشكل يوازي بعضها البعض الاخر في درجة الصفر المطلق. إلا أن المواد تفقد صفاتها الفيرومغناطيسية عندما تبلغ درجة حرارتها مقداراً معيناً يطلق عليها درجة حرارة كوري (Curie temperature) . وعندما تبلغ درجة حرارتها هذه الدرجة تصبح نفاذيتها النسبية مساوية واحداً . تتجاوز درجة حرارة المادة هذه الدرجة فأنها تسلك سلوك المواد البارامغناطيسية. فاذا كان ترتيب برم الالكترونات متعاكسا بالاتجاه ومتساويًا بالمقدار . حيث العزم النهائي للمادة يساوي صفراً فأن المادة تسمى ضديد الفيرومغناطيسية (antiferromagnetic) . اما المواد الفريمغناطيسية (ferrimagnetic) فهي حالة خاصة لضديد الفيرومغناطيسية حيث الترتيب يبقى متعاكساً ولكن العزوم غير متساوية وبهذا تمتلك المادة مغناطيسية دائمية . ان بقاء عزوم الالكترونات متراصفة بأتجاه واحد أو بأتجاه معاكس لبعضها الاخر هي مسألة في غاية التعقيد ولايمكن شرحها إلا على ضوء ميكانيك الكم وبتطبيق مبدأ الانفراد وهذا ما سنتناوله في المواضيع القادمة .

4 – 9 قاعدة هوند

لكي نفهم سلوك المواد المغناطيسية لابد من فهم التأثير المتبادل بين العزم البرمي والعزم الزاوي لالكترونات الذرة . يمكننا وصف حركة الالكترونات حول النواة بأربع اعداد كمية كما موضح في الشكل (3 – 9). إن طاقة الالكترون تتحدد بالعدد الكمي الاساسي (n) (principle quantum number) وهو عدد صحيح فأذا كان n= 1 فيمثل الطاقة الدنيا للمستويات . إن الزخم الزاوي المداري للالكترون لاي قيمة لـ n يتمثل بـ l ويأخذ القيم من صفر الى (n – 1) . يصحب الزخم الزاوي عزماً مغناطيسياً ثنائياً وبوجود المجال المغناطيسي فأن العزم المغناطيسي يدور نفسه بأتجاهات محددة نسبة الى $\vec{B}$. إن طاقة العزم المغناطيسي تعتمد على دورانه وتتحدد بالعدد الكمي المغناطيسي m وهو عدد صحيح ويأخذ القيم l + ..., 0, ..., $-l$. بالاضافة الى الاعداد الكمية m, l, n فأن الالكترون يمتلك العدد الكمي البرمي ويأخذ القيمة المسموحة $s = \pm 1/2$.



الشكل (3–9) الاعداد الكمية لالكترون في ذرة

إن الالكترونات تميل الى اشغال المدارات ذات الطاقة الدنيا مع اخذ مبدأ الانفراد بنظر الاعتبار أي أن الكتروناً واحداً يمكن أن يكون موجوداً في احد المدارات التي تتصف بالحالة s, m, l, n . ولما كانت قيمة s المسموحة تساوي $\pm 1/2$. فعلية يمكن القول : لايمكن لاكثر من الكترونين أن يحملا نفس القيم لـ s, m, l, n . اذا كانت المدارات الالكترونية مشبعة فأن العزم البرمي النهائي يساوي صفراً لان هناك

عددا من الالكترونات لها $s = + 1/2$ وهناك نفس العدد من الالكترونات لهـا $s = - 1/2$. وفي حالة وجود المجال فان العزم المداري يساوي صفراً وذلك لان الالكترون عندما يكون في الحالة $+ m$. فهناك الكترون اخر في الحالة $- m$. ان هذه المجموعة من الالكترونات تكون المدارات المشبعة . وعليه فان الالكترونات التي يمكن ان تساهم في عزم ثنائي القطب هي الالكترونات الموجودة في المدارات غير المشبعة . يطلق على هذه الالكترونات بالالكترونات التساهمية . ان تراصف برم الالكترونات في الذرة الواحدة أو الذرات المتجاورة يخضع لقاعدة تدعى بالتأثير المتبادل (exchange interaction)
إن التأثير المتبادل بين الالكترونات في المدارات غير المشبعة يميل الى ان تكون الطاقة في قيمتها الدنيا عندما تكون الالكترونات متراصفة على شكل متواز (أخذين بنظر الاعتبار تطبيــق مبدأ الانفراد) . ولمـــا كـــان معظم مدارات الـــذرات غيــر مشبعة فانها تمتلــك عزماً ثنائي القطــب . ولابد من الاشـــارة هنا ان هذه الحقيقـــة تنطبق عــلى الـــذرات الحـــرة ولاتنطبــق عــلى الجزيئات والسبــب يعــود الى كـــون طاقة التبادل لالـكترونات الذرات المجاورة تكـــون اقـــل مايمكـــن عنـدمـــا يتراصف بـــرم الـــكتروناتها بشكـــل متعاكـــس وبهـــذا فـــان عـــزم ثنائي القطب للجزيئـة يساوي صفراً . إن الكترونات المدارات الخارجية للذرات في البلورات الايونية تنتقل لتملا القشرة أو المدار في الذرة المجاورة وعلية فأن لكلا الايونين مدارات الكترونية مشبعة وبذلك لاتمتلك عزم ثنائي القطب . وعليه فان التاثير المغناطيسي للمواد يظهر في المواد الصلبة التي مدارات ذراتها الخارجية غير مشبعة اضافة على انها تحتوي عـــلى الـــكترونات تساهمية . ومن الجدول الدوري يمكن ملاحظة خمسة مجاميع تظهر فيها المغناطيسية وهي :

(مجموعة الحديد) ولها قشرة ثانوية 3d غير مشبعة .
(مجموعة البلاديوم) ولها قشرة ثانوية 4d غير مشبعة .
(العناصر النادرة) (rare- earth) وتكون قشرتها الثانوية 4f غير مشبعة .
(البـــلاتينيـــوم) ولها قشرة ثانوية 5d غير مشبعة .
(مجموعة الاكتينايدات) وتكون قشرتها الثانوية 5f غير مشبعة .

إن الحالة الدركية للذرة او الايون تتحدد بوضع الاعداد الكمية للالكترونات المنفردة ضمن مجموعة من القواعد تسمى بقواعد هوند (Hund's rules) وتتلخص بمايلـــي : -

1 - يتم ترتيب اكبر عدد ممكن من برم الالكترونات باتجاه يوازي بعضها البعض الاخر دون انتهاك مبدأ الانفراد (أي الكترونين لكل قيمة لـ m_l) ثم نعطي قيمة $s = +1/2$ أو $s = -1/2$ لكل الكترون وذلك حسب اتجاه البرم ومنها يمكن حساب الزخم الزاوي البرمي الكلي S حيث $S = \Sigma s$

2 - توزع الالكترونات التي تم تحديد برمها في القاعدة الاولى على القيم المسموحة لـ m_l ثم يحدد الزخم الزاوي المداري الكلي L ، حيث . $L = \Sigma m_l$

3 - إن الزخم الزاوي الكلي J للحالة الدركية يساوي $|L - S|$ عندما يكون عدد الكترونات القشرة الخارجية أقل من نصف العدد اللازم لاشباعها . وان $J = L + S$ عندما يكون عدد الالكترونات أكثر من نصف العدد اللازم لاشباع القشرة الخارجية . اما عندما يكون عدد الكترونات القشرة الخارجية مساوياً الى نصف العدد اللازم لاشباعها فأن $L = 0$ وان $J = S$.

إن الامثلة التالية توضح طريقة تطبيق قواعد هوند .

a – عندما يكون ايون الكوبلت Co^{2+} في الحالة $3d^7$ ($l = 2$) فأن .

m_s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
m_l	2	1	0	-1	-2	2	1	0	-1	-2

وعلية فأن قيمة

$$S = \frac{3}{2}$$

و

$$L = 3$$

b – ايون الديسبروسيوم Dy^{3+} في الحالة $4f^9$ ($l = 3$)

m_s	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
m_l	3	2	1	0	-1	-2	-3	3	2	1	0	-1	-2	-3

وبهذا فأن قيمة

$$S = 5/2$$

و

$$L = 5$$

نرمز للحالة الدركية للذرة ككل أو للايون بحروف لاتينية كبيرة تبعا للعدد الكمي للزخم الزاوي المداري . حيث

L = 0 1 2 3 4 5 6 ...

S P D F G H I ...

ويوضع عدد في الزاوية العليا اليسرى من الحرف (مثلاً ^2P) لبيان تضاعف الحالة (multiplicity of the state) ويساوي 2S + 1 ونضع العدد الكمي J، للزخم الزاوي الكلي في الزاوية اليمنى السفلى من الحرف التابع للحالة . وعلية فأن الحالة الدركية تكتب بالشكل $^{2S+1}X_J$

ان الجدول (2 ‐ 9) يوضح الحالات الدركية للمواد المغناطيسية .

الجدول (2 ‐ 9) الحالات الدركية للأيونات التي قشرتها الخارجة d أو f غير مشبعة وحسب قواعد هوند .

d-shell (l = 2)										
n	l_z = 2,	1,	0,	−1,	−2	S	$L = \|\Sigma l_z\|$	J		SYMBOL
1	↓					1/2	2	3/2		$^2D_{3/2}$
2	↓	↓				1	3	2	$J = \|L - S\|$	$^3F_2$
3	↓	↓	↓			3/2	3	3/2		$^4F_{3/2}$
4	↓	↓	↓	↓		2	2	0		$^5D_0$
5	↓	↓	↓	↓	↓	5/2	0	5/2		$^6S_{5/2}$
6	⇅	↑	↑	↑	↑	2	2	4		$^5D_4$
7	⇅	⇅	↑	↑	↑	3/2	3	9/2	$J = L + S$	$^4F_{9/2}$
8	⇅	⇅	⇅	↑	↑	1	3	4		$^3F_4$
9	⇅	⇅	⇅	⇅	↑	1/2	2	5/2		$^2D_{5/2}$
10	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	0	0	0		$^1S_0$

f-shell (l = 3)												
n	l_z = 3,	2,	1,	0,	−1,	−2,	−3	S	$L = \|\Sigma l_z\|$	J		
1	↓							1/2	3	5/2		$^2F_{5/2}$
2	↓	↓						1	5	4		$^3H_4$
3	↓	↓	↓					3/2	6	9/2	$J = \|L - S\|$	$^4I_{9/2}$
4	↓	↓	↓	↓				2	6	4		$^5I_4$
5	↓	↓	↓	↓	↓			5/2	5	5/2		$^6H_{5/2}$
6	↓	↓	↓	↓	↓	↓		3	3	0		$^7F_0$
7	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	7/2	0	7/2		$^8S_{7/2}$
8	⇅	↑	↑	↑	↑	↑	↑	3	3	6		$^7F_6$
9	⇅	⇅	↑	↑	↑	↑	↑	5/2	5	15/2		$^6H_{15/2}$
10	⇅	⇅	⇅	↑	↑	↑	↑	2	6	8	$J = L + S$	$^5I_8$
11	⇅	⇅	⇅	⇅	↑	↑	↑	3/2	6	15/2		$^4I_{15/2}$
12	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	↑	↑	1	5	6		$^3H_6$
13	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	↑	1/2	3	7/2		$^2F_{7/2}$
14	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	⇅	0	0	0		$^1S_0$

*↑ = spin ½; ↓ = spin −½.

9 - 5 نظرية لنجفان للدامغناطيسية

حاول لنجفان (Langevin) دراسة كيفية تاثير الالكترون الدائر في مدار دائري حول النواة عندما يسلط عليه مجال مغناطيسي خارجي عمودي على مستوى مداره . في الشكل (4 - 9) تكون القوة المسلطة على الالكترون من قبل النواة (قوة تجاذب) مساوية للقوة المركزية او الطاردة وكما يلي :

$$F = m\omega r^2 \qquad \dots (9-17)$$

حيث ω السرعة الزاوية للالكترون ان العزم المغناطيسي μ للالكترون يكون

$$\mu = IA = \frac{1}{2} er^2\omega \qquad \dots (9-18)$$

حيث r نصف قطر مدار الألكترون . عند تسليط مجال مغناطيسي خارجي فـأن الالكترون يقع تحت تأثير قوة اضافية تسمى قوة لورنز (Lorenz foree) . حيث

$$\vec{F}_L = -e(\underline{\vec{v}} \times \vec{B}) = -eBr\omega \qquad \dots (9-19)$$

وعليه فان محصلة القوة المؤثرة على الالكترون تساوي

$$F - eBr\omega = m\omega^2 r \qquad \dots (9-20)$$

وعليه فان السرعة الزاوية للالكترون نتيجة وجود المجال تختلف عن ω_0 ويمكن حسابها بحل المعادلة (20 - 9) لنحصل على

$$\omega = \omega_0 - \frac{eB}{2m} \qquad \dots (9-21)$$

ان المعادلة (21 - 9) تشير الى نقصان في سرعة دوران الالكترون وينتج عنها تغير في العزم المغناطيسي مقداره

$$\Delta\mu = -\left(\frac{e^2r^2}{4m}\right) B \qquad \dots (9-22)$$

ونتيجة لنقصان العزم الذي يوازي المجال ، فان العزم المحتث يكون معاكسا لاتجاه المجال وبذلك فان استجابة الالكترون دايا مغناطيسية .

ان معدل مربع نصف قطر مدار الالكترون في ثلاث اتجاهات يساوي

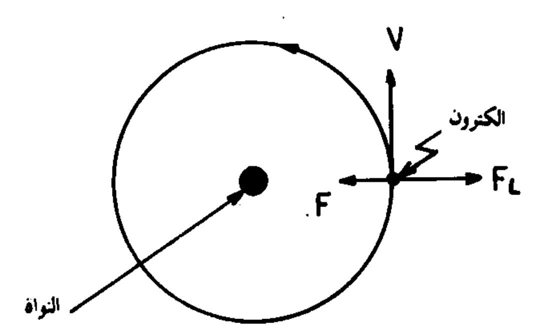
$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$$

عندما يكون توزيع الشحنة متماثلا كرويا فان

$$< x^2 > \; = \; < y^2 > \; = \; < z^2 >$$

وعليه فان r^2 في المعادلة (22 - 9) تستبدل بـ $\frac{2}{3} r^2$ وهو يمثل نصف قطر المدار الكروي

$$\therefore \Delta\mu \; = \; - \left(\frac{e}{6m} \right) < r^2 > B \qquad \ldots (9 - 23)$$



الشكل (4 - 9) اصل الظاهرة الدايامغناطيسية

ولحساب التأثرية المغناطيسية (χ) . نفترض ان الذرة تحتوي على Z من الألكترونات وهناك N من الذرات لوحدة الحجم ، وعليه

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{\mu_0 NZ \Delta\mu}{B}$$

أو

$$\chi \; = \; - \frac{\mu_0 N Ze^2}{6m} < r^2 > \qquad \ldots (9 - 24)$$

وهذه المعادلة تمثل (نتيجة لنجفان) الكلاسيكية للدايا مغناطيسية .

6 – 9 النظرية الكمية للبارامغناطيسية

ان السمة الاساسية للمواد البارا مغناطيسية هي ان التاثرية المغناطيسية اصغر من الواحد بكثير ($\chi < < 1$) ولكنها موجبة والسبب في ذلك يعود الى ان الالكترونات في هذا النوع من المواد تتحرك بصورة عشوائية وبذلك فان عزومها المغناطيسية تاخذ مختلف الاتجاهات وان محصلة العزوم هي صفر . اما اذا سلط مجال مغناطيسي خارجي على هذه المواد فان حركة الالكترونات تتغير بحيث يكون اتجاه عزومها المغناطيسية موازيا (جزئيا على الاقل) لاتجاه المجال المغناطيسي الخارجي . ومن المفيد ان نذكر هنا ان لدرجة الحرارة تاثيرا كبيرا على اتجاه العزوم المغناطيسية في هذه المواد . وعند زيادة درجة الحرارة فان الاهتزاز الحراري كفيل بتغير اتجاه العزوم المغناطيسية بحيث يتناقص العزم المغناطيسي الكلي لهذه المادة مع زيادة درجة الحرارة .

يمكن كتابة العزم المغناطيسي للذرة او الايون بدلالة الزخم الزاوي الكلي ، حيث

$$\mu = - g \mu_B J \qquad \ldots (9-25)$$

ان الكمية g تدعى بمعامل لاندى للأنقسام (Lande' splitting factor) وتاخذ القيمة التالية

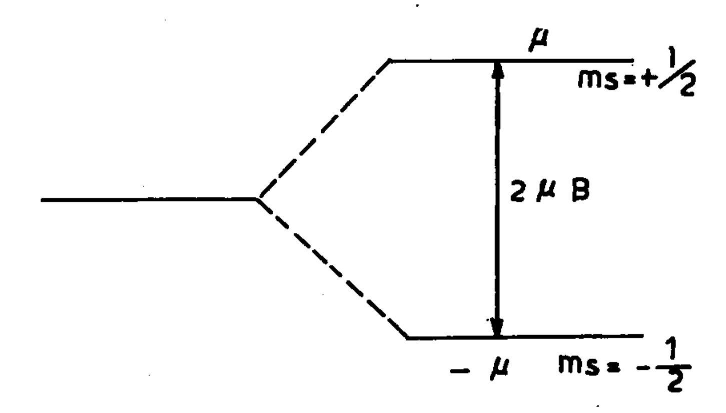
$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \qquad \ldots (9-26)$$

حيث $g = 2$ عندما $L = 0$ وتساوي واحدا عندما $S = 0$. ان مستويات الطاقة للايون بوجود المجال المغناطيسي تساوي

$$\varepsilon = - \mu . B = m_J \, g \, \mu_B B$$

حيث m_J تمثل العدد الكمي المغناطيسي وتاخذ القيم $J, J-1, \ldots, -J$

فعندما $J = S = 1/2$ (نهمل الحركة الدورانية للالكترون) فان قيم m_J المسموحة هي $\pm 1/2$ وبذلك فهناك مستويان للطاقة احدهما يعود لبرم الالكترون الموازي لاتجاه المجال والثاني يعود لبرم الالكترون المعاكس لاتجاه المجال المغناطيسي كما هوموضح في الشكل (9 - 5)



الشكل (5 - 9) مستويات الطاقة للالكترون بوجود المجال المغناطيسي

ان توزيع الايونات المغناطيسية على الحالات المغناطيسية المختلفة تتمثل بمعادلة بولتزمان

$$N_i \propto e^{-\varepsilon / K_B T} \qquad \dots (9-27)$$

حيث N_i عدد الايونات في المستوى i . لنفترض ان N_1 , N_2 يمثلان عدد الايونات في مستويات الطاقة 1 , 2 على التوالي وان N تمثل التعداد الكلي للنظام $(N = N_1 + N)$ وعليه في حالة الاتزان الحراري فان

$$\frac{N_1}{N} = \frac{\exp(\mu B / K_B T)}{\exp(\mu B / K_B T) + \exp(-\mu B / K_B T)}$$

وان

$$\frac{N_2}{N} = \frac{\exp(-\mu B / K_B T)}{\exp(\mu B / K_B T) + \exp(-\mu B / K_B T)}$$

وعليه فان نهائي التمغنط لـ N من الايونات في وحدة الحجم يســاوي

$$M = (N_1 - N_2)\mu = N\mu \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

$$= N\mu \tan hx \qquad \dots (9-28)$$

حيث x تساوي $\mu B / K_B T$

عندما تكون x اصغر من الواحد بكثير (اي ان المجال المسلط ضعيف نسبيا) فان

$$\tanh x \cong x$$

وعليه فان المعادلة (28 – 9) تصبح

$$M \cong N\mu (\mu B / K_B T) \quad \dots (9-29)$$

وان التاثرية المغناطيسية χ تاخذ الصيغة التالية :

$$\chi = \frac{M}{B} = \frac{Ng^2 \mu_B^2}{K_B T} \quad \dots (9-30)$$

ان الاشتقاق اعلاه للمتاثرية المغناطيسية ينطبق فقط على الحالة التي لها $J = 1/2$. الا ان عدد مستويات الطاقة للذرة او الايون التي زخمها الزاوي الكلي J يساوي $(2J + 1)$ بوجود المجال المغناطيسي وعليه فان التمغنط الكلي M يساوي

$$M = NgJ \mu_B B_J (x) \quad \dots (9-31)$$

حيث $x \equiv \dfrac{gJ \mu_B B}{K_B T}$ وان $B_J(x)$ تسمى داله بريلوين ،

حيث

$$B_J (x) = \frac{1}{J} \left[\left(J + \frac{1}{2} \right) \coth \left(J + \frac{1}{2} \right) x - \frac{1}{2} \coth \frac{1}{2} x \right] \quad \dots (9-32)$$

ان الشكل (6 – 9) يوضح دالة بريلوين لعدد من قيم J المختلفة . ان المعادلة (29 – 9) هي حالة خاصة لمعادلة التمغنط العامة (31 – 9) حيث $J = 1/2$. وعندما تكون $x << 1$ فان

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} \quad \dots$$

وعليه فان $B_J(x)$ لقيم x الصغيرة تساوي

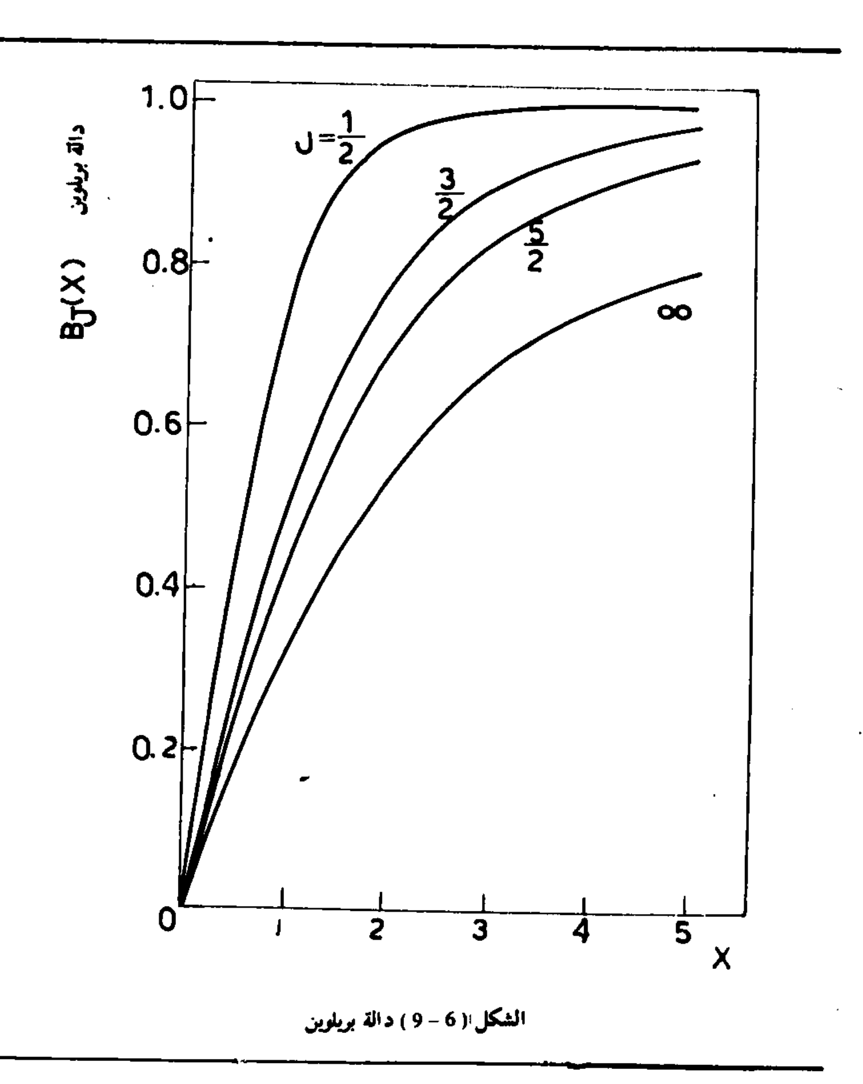
$$B_J (x) = \frac{1}{J} \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{\left(J + \frac{1}{2} \right) x} + \frac{1}{3} \left(J + \frac{1}{2} \right) x \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{2}{x} + \frac{x}{6} \right] \right\}$$

$$= \frac{1}{J}\left\{\frac{1}{3}\left(J+\frac{1}{2}\right)^2 x - \frac{x}{12}\right\}$$

$$= \frac{x}{3J}\left(J^2 + J + \frac{1}{4} - \frac{1}{4}\right)$$

عندما $x < < 1$ فان

$$B_J(x) \doteq \frac{J+1}{3}\, x \qquad \dots (9-33)$$



الشكل (6 – 9) دالة بريلوين

وبالتعويض عن قيمة $B_J(x)$ من المعادلة(33 - 9)في المعادلة(31 - 9)نحصل على

$$M = Ng\mu_B J \frac{(J+1)}{3} x = \frac{Ng^2 \mu_B^2 J(J+1) B}{3 K_B T}$$

$$= \frac{NJ(J+1) g^2 \mu_B^2}{3 K_B T} B$$

وان المتاثرية المغناطيسية χ تساوي

$$\chi = \frac{M}{B} = \frac{NJ(J+1) g^2 \mu_B^2}{3 K_B T} = \frac{NP^2 \mu_B^2}{3 K_B T} = \frac{C}{T} \quad \ldots (9-34)$$

حيث P العدد الفعلي لمغنيط بور (effective Bohr magneton) ويساوي

$$P = g[J(J+1)]^{1/2} \quad \ldots (9-35)$$

وان المعادلة(34 - 9)تمثل قانون كوري وان C هو ثابت كوري ، حيث

$$C = \frac{NP^2 \mu_B^2}{3 K_B} \quad \ldots (9-36)$$

ان الجدولين (3 - 9) , (4 - 9) يقارنان قيم P المحسوبة من المعادلة (35 - 9)
والقيم المقاسة عملياً عن طريق قياس التأثرية المغناطيسية

الجدول(3 - 9)القيم المحسوبة والقيم المقاسة لمغنيط بور الفعلي لايونات العناصر النادرة .

ELEMENT (TRIPLY IONIZED)	BASIC ELECTRON CONFIGURATION	GROUND-STATE TERM	CALCULATED P	MEASURED P
La	$4f^0$	1S	0.00	diamagnetic
Ce	$4f^1$	$2F_{5/2}$	2.54	2.4
Pr	$4f^2$	$3H_4$	3.58	3.5
Nd	$4f^3$	$^4I_{9/2}$	3.62	3.5
Pm	$4f^4$	$5I_4$	2.68	–
Sm	$4f^5$	$^6H_{5/2}$	0.84	1.5
Eu	$4f^6$	$^7F_0$	0.00	3.4
Gd	$4f^7$	$^8S_{7/2}$	7.94	8.0
Tb	$4f^8$	$^7F_6$	9.72	9.5
Dy	$4f^9$	$^6H_{15/2}$	10.63	10.6
Ho	$4f^{10}$	$^5I_8$	10.60	10.4
Er	$4f^{11}$	$^4I_{15/2}$	9.59	9.5
Tm	$4f^{12}$	$^3H_6$	7.57	7.3
Yb	$4f^{13}$	$^2F_{7/2}$	4.54	4.5
Lu	$4f^{14}$	^1S	0.00	diamagnetic

الجدول(4- 9)القيم المحسوبة والقيم المقاسة لمغنيط بور الفعلي لايونات مجموعة الحديد

ELEMENT (AND IONIZATION)	BASIC ELECTRON CONFIGURATION	GROUND-STATE TERM	CALCULATED P (J = S)	CALCULATED P (J = |L ± S|)	MEASURED P
Ti^{3+}	$3d^1$	$^2D_{3/2}$	1.73	1.55	–
V^{4+}	$3d^1$	$^2D_{3/2}$	1.73	1.55	1.8
V^{3+}	$3d^2$	$^3F_2$	2.83	1.63	2.8
V^{2+}	$3d^3$	$^4F_{3/2}$	3.87	0.77	3.8
Cr^{3+}	$3d^3$	$^4F_{3/2}$	3.87	0.77	3.7
Mn^{4+}	$3d^3$	$^4F_{3/2}$	3.87	0.77	4.0
Cr^{2+}	$3d^4$	$^5D_0$	4.90	0	4.8
Mn^{3+}	$3d^4$	$^5D_0$	4.90	0	5.0
Mn^{2+}	$3d^5$	$^6S_{5/2}$	5.92	5.92	5.9
Fe^{3+}	$3d^5$	$^6S_{5/2}$	5.92	5.92	5.9
Fe^{2+}	$3d^6$	$^5D_4$	4.90	6.70	5.4
Co^{2+}	$3d^7$	$^4F_{9/2}$	3.87	6.54	4.8
Ni^{2+}	$3d^8$	$^3F_4$	2.83	5.59	3.2
Cu^{2+}	$3d^9$	$^2D_{5/2}$	1.73	3.55	1.9

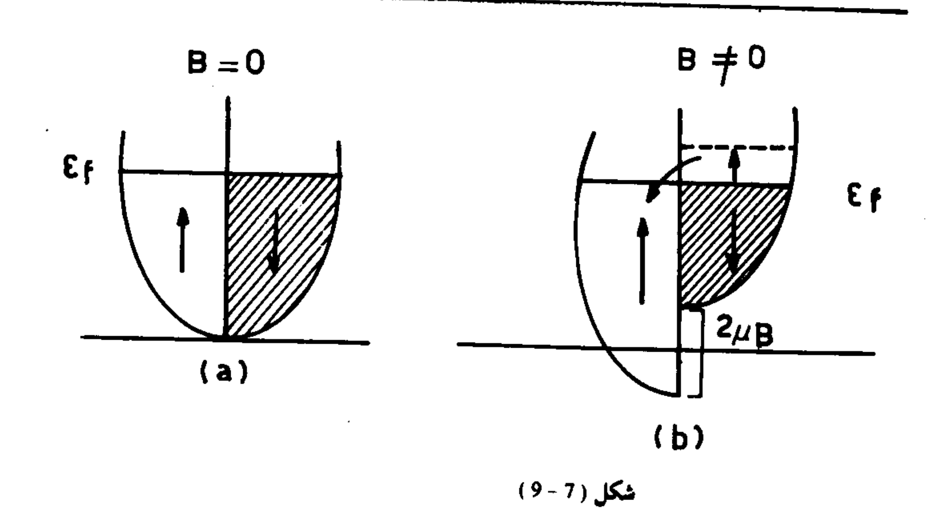
7 – 9 التأثرية البارامغناطيسية لالكترونات التوصيل :

لم تفلح النظرية الكلاسيكية للالكترونات الحرة في تفسير منشأ البارامغناطيسية للمعادن . ان الكترونات التوصيل لها عزم مغناطيسي برمي يساوي مغنيط بور واحد ويحاول هذا العزم ان ياخذ اتجاه المجال المغناطيسي المسلط . وعليه وللوهلة الاولى عند حساب المتأثرية المغناطيسية للمعادن سوف نستخدم المعادلة (9 – 34) وبالتعويض عن $j = s = 1/2$ نحصل على

$$\chi = \frac{N\mu_B^2}{K_B T} \qquad \ldots (9-37)$$

حيث χ تعتمد على درجة الحرارة . ان التجارب العملية تشير الى ان التأثرية المغناطيسية الناتجة عن برم الكترونات التوصيل في المعادن لا تعتمد على درجة الحرارة وان قيمتها اقل مما هو متوقع من المعادلة (9 – 37) إن السبب في هذا الاختلاف هو ان المعادلة (9 – 37) تم اشتقاقها على اساس ان الالكترونات موضعيه (localized) وتتبع توزيع ماكسويل – بولتزمان ، الا ان الكترونات التوصيل في المعادن لا تكون متمركزة وتتبع قانون فيرمي – ديراك. ان الشكل (9 – 7) يوضح الطريقة المستخدمة في حساب التأثرية البارامغناطيسية للمعادن ، حيث في حالة عدم وجود مجال مغناطيسي خارجي فان نصف عدد الالكترونات لها برماً بأتجاه محور z الموجب والنصف الاخر يأخذ اتجاه z السالب وبذلك فان محصلة التمغنط للمعدن يساوي صفراً (الشكل 9 – 7a).
وعند تسليط مجال مغناطيسي خارجي بأتجاه محور z فان طاقة الالكترونات ذات البرم الموازي لاتجاه المجال تقل بمقدار $\mu_B B$ بينما تزداد طاقة الالكترونات ذات البرم المعاكس لاتجاه المجال بنفس المقدار (الشكل 9 – 7b) .
ان معظم الكترونات التوصيل في المعدن ليست لها الفرصة لتغيير اتجاه برمها عند تسليط المجال المغناطيسي حيث مدارات الالكترونات داخل سطح فيرمي ذات البرم الموازي للمجال تكون مشبعة وعليه لا تستطيع تغيير البرم وحسب مبدأ الانفراد . بينما جزء قليل فقط من الالكترونات والتي تقع قرب سطح فيرمي تمتلك طاقة بحدود $K_B T$ تكون لها الفرصة لتغيير اتجاه برمها وتستطيع بذلك ان تساهم في البارامغناطيسية للمعادن.
ولحساب التأثرية المغناطيسية لابد من معرفة عدد الالكترونات المؤثرة والتي تساهم في تمغنط المادة والتي تساوي

$$N_{eff} = \frac{1}{2} D(\varepsilon_f)\mu_B B \qquad \ldots (9-38)$$



شكل (7 - 9)

حيث $D(\varepsilon_f)$ هي كثافة الحالة عند سطح فيرمي (ادخل العدد 1/2 في المعادلة (38 - 9) لناخذ بنظر الاعتبار اتجاهاً واحداً للبرم) . ان تغير اتجاه برم الالكترون يزيد تمغنط المادة بمقدار $2\mu_B$ (من μ_B − الى μ_B +كما هو موضح في الشكل (7 - 9) وعليه فان محصلة التمغنط تساوي

$$M = N_{eff}\, 2\mu_B = \mu_B^2\, D(\varepsilon_f)\, B \quad \dots (9-39)$$

ومنها نحصل على التأثرية المغناطيسية $\chi_{C\cdot E}$ لالكترونات التوصيل

$$\chi_{C\cdot E} = \mu_B^2\, D(\varepsilon_f) \quad \dots (9-40)$$

وبذلك فان التأثرية المغناطيسية تتحدد بكثافة الحالة والتي تلعب دوراً مهماً في الخواص الكهربائية للالكترونات . ان $\chi_{C\cdot E}$ لا تعتمد على درجة الحرارة نتيجة الى كون توزيع فيرمي − ديراك للالكترونات لا يتأثر كثيراً بأرتفاع درجة الحرارة . عندما

$$D(\varepsilon_f) = \frac{3N}{2\varepsilon_f}$$

فأن

$$\chi_{C\cdot E} = \frac{3}{2}\, \chi_p \, \frac{T}{T_f} \quad \dots (9-41)$$

حيث χ_p التأثرية المغناطيسية للمواد البارامغناطيسية (المعادلة 37 - 9) وان T_f درجة حرارة فيرمي($\varepsilon_f = K_B T_f$). ولما كانت درجه حرارة فيرمي كبيرة جداً وغالباً ما تساوي $10^5 \times 3$ كيلفن او اكبر فان

$$\chi_{C \cdot E} << \chi_p$$

اشار لانداو (Landau) بان الالكترونات الحرة تحمل عزماً دايامغناطيسياً يساوي ثلث العزم البارامغناطيسي ، وعليه

$$\chi_{dia} = - \frac{1}{2} \chi_p \frac{T}{T_f} \qquad \ldots (9 - 42)$$

وعليه فان التاثرية الكلية لالكترونات التوصيل تساوي

$$\chi_{total} = \chi_{C \cdot E} + \chi_{dia}$$

$$= \frac{3}{2} \chi_p \frac{T}{T_f} - \frac{1}{2} \chi_p \frac{T}{T_f}$$

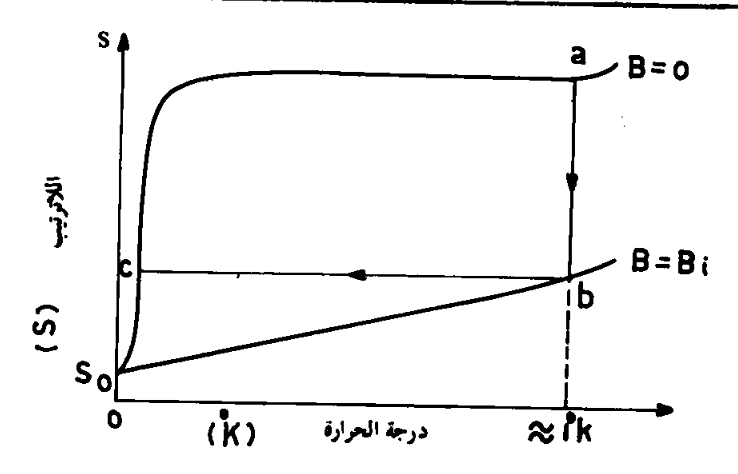
$$= \chi_p \frac{T}{T_f}$$

وعليه

$$\chi_{total} = \frac{N \mu_B^2}{K_B T_f} \qquad \ldots (9 - 43)$$

8 - 9 التبريد باستخدام الاملاح البارامغناطيسية

تبين اغلب خواص المادة تغيرات مثيرة او اختلافات في مدى درجات الحرارة الاقل من 20 كيلفن . ويمكن ببساطة الحصول على درجة حرارة واطئة حتى حوالي واحد كيلفن وذلك بتبخير سائل الهليوم ^4He بسرعة . اما اذا استعمل غاز هليوم ^3He فيمكن الوصول الى درجة حرارة 0.3 كيلفن . يمكن الوصول لدرجات حرارة واطئة جداً (حوالي 10^{-3} كيلفن) وذلك باستعمال الاملاح البارامغناطيسية . ومبدأ هذه الطريقة موضح بالشكل 8 - 9 وذلك بتغيير اللاترتيب S لنظام من الايونات المغناطيسية مع درجات الحرارة لقيمتين للمجال الخارجي هما $B = 0$ و $B = B_1$



الشكل (8 - 9) يتناقص اللاترتيب عندما يزداد المجال المغناطيسي بثبوت درجة الحرارة من b ← a وتتناقص درجة الحرارة عندما يقلل المجال المغناطيسي دون تبادل حراري من b → c (حتى المجال صفر)

يتمغنط الملح بثبوت درجة الحرارة (isothermally) عندما b ← a بالقرب من درجة حررة واحد كيلفن حيث تكون السعة الحرارية للجسيمات غير المغناطيسية صغيرة الى حد الاهمال . لهذه المنطقة (a → b) فان المعادلة

$$T \frac{dS}{dT} = \frac{dU}{dT} + \mu_0 T \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_B dB$$

تاخذ الصيغة التالية

$$T \ dS = 0 + \mu_0 T \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_B dB$$

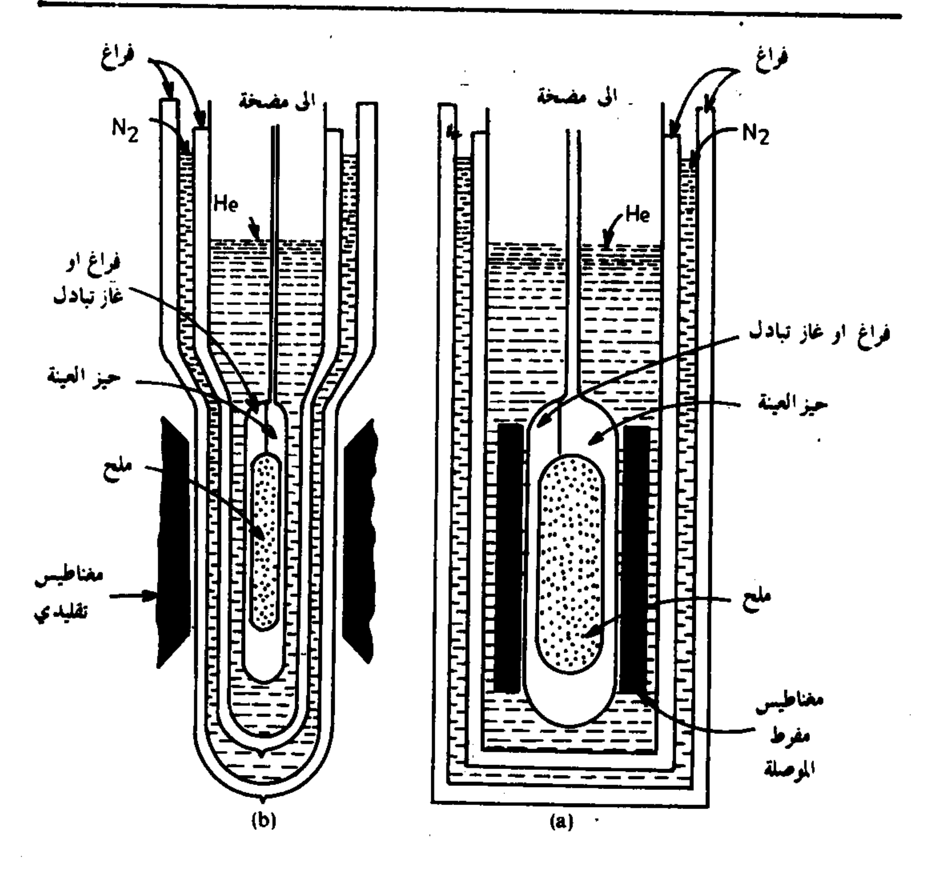
ويعتبر التفاضل $(\partial M / \partial T)_B$ مقياساً في تغير اصطفاف برم الايونات المصاحبة لارتفاع درجة الحرارة (تاثير لاترتيبي) حينما يحفظ المجال الخارجي ثابتاً . لذا فقيمة هذا التفاضل سالبة للاملاح البارامغناطيسية . وحيث ان $(\partial M / \partial T)_B$ سالب فتنساب الحرارة الى الخارج اثناء المغنطة عند ثبات درجة الحرارة . ان الخطوة التالية b → c هي عبارة عن نقص دون تبادل حراري (adiabatically) انعكاسي في قيمة B .

يكون فيه

$$0 = \left(\frac{dU}{dT} \right)_B dT + \mu_0 T \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_B dB$$

وحيث كل من $(\partial M / dT)_B$ و dB مقدارسالب اذن dT مقدارسالب . يسمى هذا التغيرفي درجة الحرارة (بالتأثير الحراري المغناطيسي) واول من أجرى تجارب من هذا النوع هوجيوك بأمريكا ثم تبعة كيرتي وسايمون في انكلترا ودي هازفي هولندا . في هذه التجارب يبرد ملح المواد البارامغناطيسية الى اقل درجة حرارية ممكنة بالاستعانة بالهليوم السائل . بعد ذلك يستعمل مجال مغناطيسي قوى ينتج ارتفاعاً في درجة حرارة المادة يتلوها انسياب للحرارة الى الهليوم المحيط والذي يتبخر بعض منه . وبعد فترة تتمغنط المادة مغنطة قوية وتبرد لاقل ما يمكن . عند هذه اللحظة يفرغ الحيز المحيط بالمادة ويخفض عندئذ المجال المغناطيسي الى الصفر وتنخفض درجة حرارة الملح البارا مغناطيسي الى قيمة منخفضة .

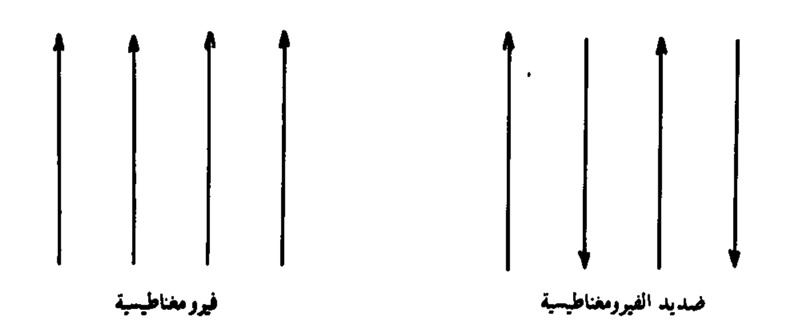
إن الاملاح البارا مغناطيسية إما ان تكون بلورة واحدة أو مسحوق مضغوط أو خليط من البلورات الصغيرة على شكل كرة أو اسطوانه وتوضع في حيز يمكن توصيله في وقت ما بمضخة وفي وقت اخر بمصدر غاز . يحاط هذا الحيز بالهليوم السائل الذي يمكن التحكم في ضغطه (وبالتالي في درجة حرارته) ويحيط بالهليوم السائل ناتيروجين سائل ويفرغ الحيز بينهما. يدخل غاز الهليوم للحيز المحتوى على ملح بارا مغناطيسي قبل تسليط المجال المغناطيسي . تتسرب درجة الحرارة الناتجة عن تسليط المجال من خلال غاز الهليوم الى الهليوم السائل . وبعبارة أخرى نقول اننا قد استعملنا غاز الهليوم كموصل للحرارة ويمكن الملح البارامغناطيسي من الوصول الى درجة حرارة الاتزان بسرعة . لذا يسمى هذا الغاز بغاز التبادل والذي يطرد بمجرد الوصول الى درجة حرارة الاتزان ويترك الملح معزولاً حرارياً . استخدم سابقاً مغناطيس كهربائي ضخم لتوليد المجال المطلوب أما حديثاً فقد صنعت ملفات لولبية مكونه من عدة ألاف من اللفات المكونه من سلك مصنوع من مادة ذوتوصيلية مفرطة يمكن أن يمر خلالها تياراً تتراوح قيمتة من100 – 10أمبير لاتتبدد أي طاقة في في الملف طالما انه محفوظ عند درجة حرارة اقل من تلك التي يصبح عندها السلك مفرط الموصلية . من محاسن استخدام مغناطيس مفرط الموصلية (1) يمكن جعل حيز العينة أكبر و (2) يمكن جعل المجال المغناطيسي اقوى و (3) نقصان في تكاليف تصنيعه و (4) القدرة المطلوبة قليلة جدا حيث لايوجد تبديد فيها. ان الشكل (9 – 9) يوضح الجهاز الحديث والجهاز التقليدي في تجربة التبريد بواسطة الاملاح البارامغناطيسية



الشكل(9 - 9) جهاز التبريد بواسطة الاملاح البارامغناطيسية (a) باستخدام مغناطيس مفرط الموصلية (b) باستخدام مغناطيس تقليدي

٥ - 9 المواد الفيرومغناطيسية وضديدة الفيرومغناطيسية

إن المواد المغناطيسية من نوع فيرومغناطيسية أوضديدة الفيرومغناطيسية تمتلك عزم ثنائي القطب حتى في حالة غياب المجال المغناطيسي وهذه المواد تختلف عن المواد البارامغناطيسية التي لاتظهر صفاتها المغناطيسية الا بتسليط مجال مغناطيسي خارجي . ان التأثير المتبادل بين الايونات المغناطيسية هو السبب في ترتيب عزومها المغناطيسية ويجب ان يكون كبيراً لكي يطغي على الاهتزازات الحرارية التي تسبب عدم الترتيب في اصطفاف العزوم المغناطيسية . ان الشكل 10 - 9 يوضح ترتيب برم الألكترونات عندما تكون المادة فيرومغناطيسية أو ضديدة الفيرومغناطيسية .



الشكل (10 - 9) ترتيب العزوم المغناطيسية في المواد الفيرومغناطيسية وضديدة الفيرومغناطيسية

1 - 9 - 9 خواص المواد الفيرومغناطيسية

إن التأثير المتبادل بين برم الالكترونات المتجاورة يميل الى تراصف عزومها المغناطيسية بأتجاة يوازي بعضها البعض الاخر وبذلك تصبح المادة فيرومغناطيسية . هذا النوع من التأثير المتبادل يولد ما يسمى بالمجال المتبادل (exchange field) . ان زيادة درجة تراصف العزوم المغناطيسية يعني زيادة المجال الداخلي والذي بدوره يؤدي الى زيادة في ترتيب العزوم . افترض وايز (weiss) بأن المجال الداخلي B_i يتناسب مع التمغنط μ ، أي أن

$$B_i = \lambda M \qquad \dots (9-43)$$

حيث λ ثابت المجال الداخلي والتي تحدد قوة التأثير المتبادل بين العزوم المغناطيسية في المادة . وعلية فأن المجال الكلي المؤثر على المادة عند تسليط مجال مغناطيسي B_a خارجي يصبح

$$B_{tot} = B_a + \lambda M \qquad \dots (9-44)$$

وبأستخدام معادلة كوري (34 - 9) نحصل على

$$M = \frac{C}{T} (B_a + \lambda M)$$

$$M = \frac{C}{T - \lambda C} B_a \qquad \dots (9-45)$$

من المعادلة (45 - 9) يمكن ان نحصل على التأثيرية المغناطيسية χ

$$\chi = \frac{M}{B_a} = \frac{C}{T - \lambda C}$$

$$= \frac{C}{T - T_c} \qquad \ldots (9 - 46)$$

حيث $T_c = \lambda C$ يطلق على المعادلة (46 - 6) بقانون كوري –وايز (Curie-weiss law). عند درجة حرارة $T = T_c$ فأن الاهتزازات الحرارية تكون عالية وبذلك فأن المجال الداخلي غير كاف لترتيب العزوم المغناطيسية وعلية فأن المادة تسلك سلوك المواد البارا مغناطيسية . لابد من الاشارة هنا بأن المجال الداخلي هو ليس مجالاً مغناطيسياً بالمعنى الحقيقي ولكنه قوة تحاول ترتيب العزوم المغناطيسية وشدة هذه القوة تعتمد على درجة التراصف لان المجال الداخلي يتناسب مع التمغنط .

عند درجة حرارة $T \leq T_c$ فأن التأثيرية المغناطيسية χ تكون سالبة وهذا يعني عدم امكانية تطبيق قانون كوري وايز (المعادلة 46 - 9) عند هذه الدرجات الحرارية . وعندما $T = T_c$ فأن التاثيرية المغناطيسية تصبح مالانهاية (الشكل 11 - 9) وهذا يعني وجود تمغنط تلقائي (Spontaneous Magnetization) حتى لو لم يسلط مجال مغناطيسي خارجي لحساب كمية التمغنط . يمكن استخدام المعادلة (28 - 9) وتعويض المجال المغناطيسي بـ ($Ba + \lambda M$) . أي أن :

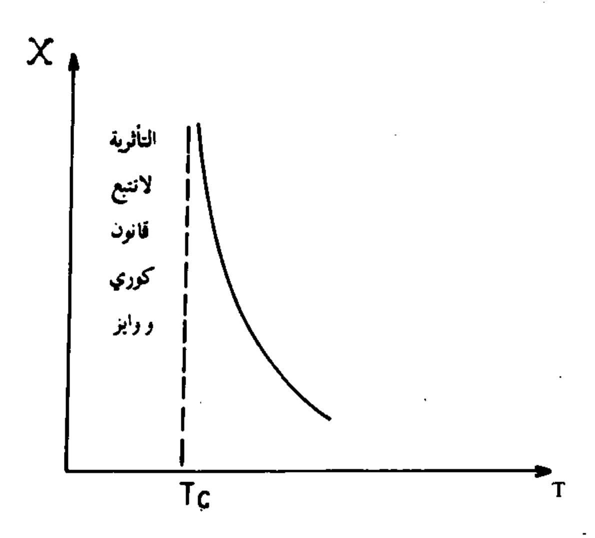
$$M = N\mu \tanh \left[\frac{\mu}{K_B T} (B_a + \lambda M) \right] \qquad \ldots (9 - 47)$$

وعندما $B_a = 0$ فان المعادلة (47 - 9) تصبح

$$M = N\mu \tanh \left(\frac{\mu \lambda M}{K_B T} \right)$$

او

$$\frac{M}{N\mu} = \frac{M}{M_{sat}} = \tanh\alpha \qquad \ldots (9 - 48)$$



الشكل(11 - 9)اعتماد التأثرية المغناطيسية للمواد الفيرومغناطيسية على درجة الحرارة

حيث $\alpha = \frac{\mu \lambda M}{K_B T}$, $M_{sat} = N\mu$ وتمثل حالة الاشباع للمتغنط أو بمعنى اخر تمثل اقصى قيمة للتمغنط عندما تتراصف جميع العزوم المغناطيسية بصورة موازية لبعضها الاخر. يمكن اعادة كتابة المعادلة (48 - 9) لتصبح

$$\frac{M}{M_{sat}} = \tanh\left(\frac{N\mu^2 \lambda M}{N\mu K_B T}\right) = \tanh\left(\frac{M}{M_{sat}} \frac{T_c}{T}\right)$$

... (9 - 49)

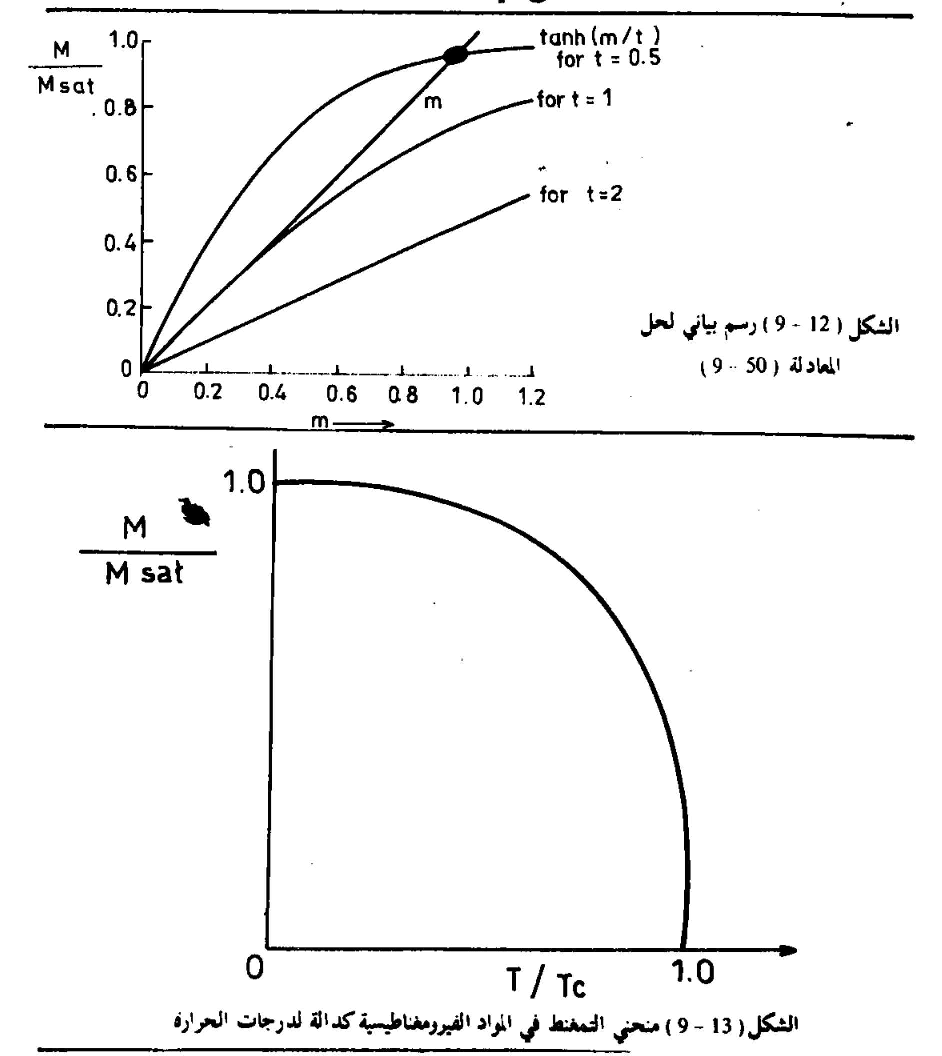
حيث $T_c = \lambda C$ و $M_{sat} = N\mu$

وبالتعويض عن $t = \frac{T}{T_c}$ و $m = \frac{M}{M_{sat}}$ في المعادلة(49 - 9)نحصل على

$$m = \tanh (m / t) \qquad ... (9 - 50)$$

ولحل هذه المعادلة . نرسم الطرف الايسر من المعادلة(50 - 9) والطرف الايمن منها كدالة لـ m كل على انفراد (لاحظ الشكل 12 - 9) . وعندما $t = 0.5$ ($T < T_c$) فان المنحنيان يتقاطعان عند $m = 0.94\ N\mu$ وبذلك فان المادة تقع

ضمن منطقة الفيرومغناطيسية ولها عزم تلقائي مقداره $0.94N\mu$. وعندما $t \to 0$ فان $m = 1$ وبذلك فان تمغنط المادة يصل حد الاشباع وان جميع العزوم المغناطيسية ترتب نفسها بشكل يوازي بعضها البعض الاخر عند درجة الصفر المطلق . وعندما $t = 1$ $(T = T_c)$ فان المنحني $tah(m/t)$ يمس الخط المستقيم m عند نقطة الاصل وبذلك تشير الى بداية ظهور الخاصية الفيرومغناطيسية للمادة . ولكن عند $t=2$ $(T > T_c)$ فان المنحنيين يلتقيان عند نقطة الاصل فقط وتكون المادة في منطقة البارا مغناطيسية . ومما تقدم يمكننا رسم منحني التمغنط كدالـــة لدرجات الحرارة كما هو موضح في الشكل (9 - 13)

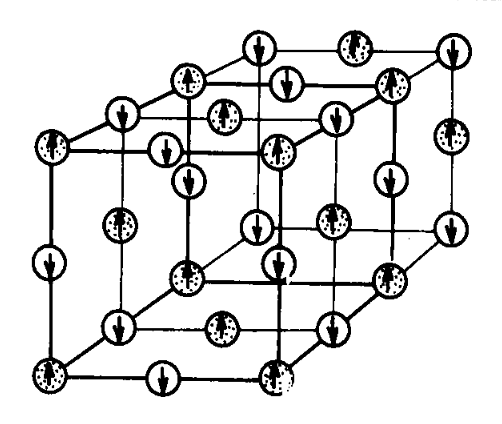


الشكل (9 - 12) رسم بياني لحل المعادلة (9 - 50)

الشكل (9 - 13) منحني التمغنط في المواد الفيرومغناطيسية كدالة لدرجات الحرارة

2 – 9 – 9 خواص المواد ضديدة الفيرومغناطيسية

يطلق على المواد التي تترتب عزومها المغناطيسية بصورة يعاكس بعضها البعض الاخر بضديد الفيرومغناطيسية ويطلق على درجة الحرارة التي عندها يحدث هذا لنوع من التراصف بدرجة حرارة نابيل T_N (Nee'l temperature) ويمكن اعتبار هذه العزوم موزعة على شبيكتين فرعيتين (Sub-lattices) متشابهتين حيث العزوم المغناطيسية متوازية مع بعضها الاخر للشبيكة الواحدة ولكنها معاكسة للشبيكة الفرعية الاخرى . وعليه عندما تتشابه هذه الشبيكات مغناطيسيا فان العزم المغناطيسي الكلي للبلورة يساوي صفرا كما هو موضح في الشكل (14 – 9)



الشبيكة الفرعية X لها برم موجب
الشبيكة الفرعية Y لها برم سالب

الشكل (14 - 9) التركيب المغناطيسي للمواد الفيرومغناطيسية

وعندما لا تتشابه مغناطيسيا فهناك عزم مغناطيسي كلي وبذلك يطلق على المادة فيريمغناطيسية (ferrimagnetic) . ولدراسة سلوك المواد ضديدة الفيرومغناطيسية نفترض ان العزم المغناطيسي للأيون التابع للشبيكة الفرعية X يتفاعل مع العزم المغناطيسي للأيون التابع للشبيكة الفرعية Y بواسطة المجال الداخلي B_{iY} . لنفترض ان M_Y تمثل تمغنط الشبيكة Y وان B_a يمثل المجال المغناطيسي الخارجي المسلط وعليه فان المجال المغناطيسي الكلي B_x والمؤثر على الشبيكة X هو

$$B_x = B_a + B_{iY} = B_a - \lambda M_Y \qquad \dots (9 - 51)$$

وبنفس الطريقة نحصل على

$$B_y = B_a + B_{ix} = B_a - \lambda M_x \qquad \ldots (9 - 52)$$

ان الاشارة السالبة تعني محاولة العزوم المغناطيسية التابعة للشبيكة X بترتيب نفسها باتجاه معاكس لتلك التابعة للشبيكة Y والعكس صحيح . يمكن حساب تمغنط كل شبيكة على انفراد وذلك باستخدام المعادلتين (9 - 51) , (9 - 52) لنحصل على :

$$M_x = \frac{1}{2}\frac{C}{T}(B_a - \lambda M_Y)$$

و

$$M_Y = \frac{1}{2}\frac{C}{T}(B_a - \lambda M_x)$$

بذلك

$$M = M_x + M_Y = \frac{1}{2}\frac{C}{T}\{2B_a - \lambda(M_x + M_Y)\}$$

وعليه فان التاثرية المغناطيسية χ تساوي

$$\chi = \frac{M}{B_a} = C\ \{1 - \lambda(M_x + M_Y)/2B\}/T$$

$$\chi = \frac{C}{T + T_N} \qquad \ldots (9 - 53)$$

حيث

$$T_N = \frac{\lambda C}{2}$$

ان المعادلة (9 - 53) هي قانون كوري –وايز للمواد ضديدة الفيرومغناطيسية ويكون ساري المفعول عندما $T > T_N$ فقط . وعليه يمكن تعريف درجة الحرارة T_N بانها الدرجة الحرارية التي عندها تتحول المادة من حالة البارامغناطيسية الى ضديد الفيرومغناطيسية .

9 - 10 الرنين النووي المغناطيسي

اذا وضعت نواة عزمها المغناطيسي μ_N وزخمها الزاوي الكلي $I\hbar$ ، في مجال مغناطيسي B_0 فان مقدار طاقة التبادل (exchange energy) مع هذا المجال هي :

$$E_m = -\mu_N B_0 \quad \dots (9-54)$$

ان مستويات الطاقة وبوجود المجال المغناطيسي الخارجي تنقسم الى مستويات ثانوية (sub - levels) وعددها يعتمد على قيمة الزخم الزاوي الكلي ويساوي (2I + 1) . ان فرق الطاقة بين اي مستويين ثانويين متجاورين يســـــاوي

$$\Delta E = B_0 \gamma \hbar \quad \dots (9-55)$$

حيث γ تسمى بنسبة العزم المغناطيسي الى الزخم الزاوي . يمكننا اثارة مستويات الطاقة المكممة هذه لنوى بعض الذرات بوجود المجال المغناطيسي وذلك بتسليط مجـــال كهرومغناطيسي ذي ترددات عالية . حيث يحدث الرنين المغناطيسي النووي (nuclear magnetic resonance) عندما تساوي الطاقة الممتصة $\hbar\omega_0$ فرق الطاقة بين المستويات الثانوية . وعليه فان :

$$\hbar\,\omega_0 = B_0 \gamma \hbar$$
$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad \dots (9-56)$$

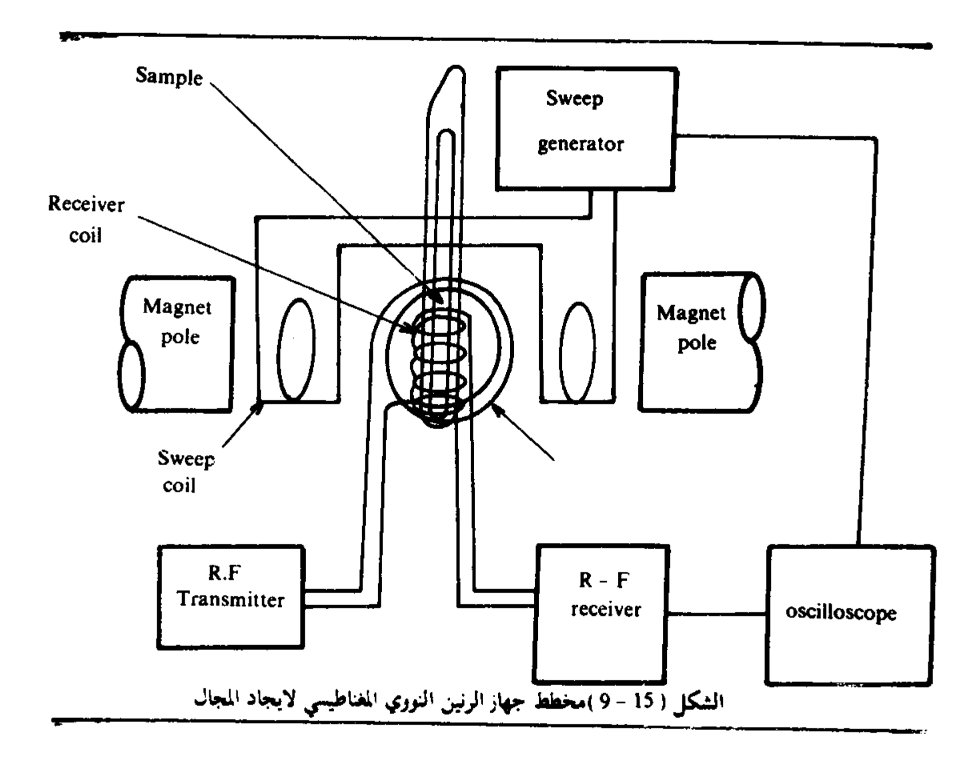
حيث ω_0 تمثل التردد الزاوي للاشعة الكهرومغناطيسية وان الجدول (5 - 9) يوضح قيم γ لبعض النوى .

الجدول (5 9) قيم γ لبعض النوى

النواة	$\gamma\ (T^{-1} S^{-1})$
^1H (proton)	$2{\cdot}6753 \times 10^8$
^2D (deutron)	$4{\cdot}1064 \times 10^7$
^7Li	$1{\cdot}0396 \times 10^8$

ان من اهم تطبيقات الرنين النووي المغناطيسي هو استخدامه كمجس حساس (sensitive probe) لايجاد المجال المغناطيسي الداخلي (internal field) والكشف عن نوعية تمغنط المادة .

ان الشكل (15 - 9) يوضح احدى الطرق المستخدمة في قياس قيمة ذلك المجال . هناك ثلاثة ملفات متعامدة مع بعضها هي ملفا تضمين المجال (field - modulating coil) وملف الارسال (transmitter coil) وملف الاستلام (receiver coil) . ان ملف الارسال يغذى عن طريق مولد ترددات راديوية لتوظيفه في تكوين مجال عمودي على المجال المراد قياسه . ان النوى المراد اثارتها لاجراء القياسات تحفظ في انبوب داخل مجموعة الملفات الثلاثة ، واذا كانت النوى هي البروتونات فيستخدم بذلك الماء . نبدا بتغير تردد الاشارة الراديوية حتى نحصل على الرنين ويلتقط عن طريق ملف الاستلام ويظهر على شاشة راسم الذبذبات (oscilloscope) لتحديد قيمة التردد الذي حصل عنده الرنين المغناطيسي . وتعتبر هذه الطريقة من اكثر الطرقة دقة وحساسية ، في حساب قيمة المجال المغناطيسي . حيث يمكن التحسس بتغير مقداره 2×10^{-7} تسلا في مجال قدره 0.8 تسلا



الشكل (15 - 9) مخطط جهاز الرنين النووي المغناطيسي لايجاد المجال

الاسئلة

9 - 1 جد الحالات الدركية (ground states) للايونات السيريوم Ce^{3+} و البروميثيوم Pm^{3+} واليروبيوم Eu^{3+} وذلك باستخدام قواعد هونـد .

9 - 2 برهن على ان النسبة بين التأثرية المغناطيسية للبارامغناطيسية χ_{par} (حسب قانون كوري) والتأثرية المغناطيسية للدايامغناطيسية χ_{dia} (حسب قانـون لنجفان) كما يلي :

$$\frac{\chi_{par}}{\chi_{dia}} = -\frac{2J(J+1)}{ZK_BT} \quad \frac{\hbar^2}{m < r^2 >}$$

9 - 3 اذا علمت ان طاقة فيرمي (ε_f) للبوتاسيوم تساوي 2.1 الـكترون – فولت . احسب مقدار التأثرية البارامغناطيسية لترمكعب من البوتاسيوم .

9 - 4 اذا علمت ان أيون الـكروم Cr^{2+} يمتلك اربعة الـكترونات في القشرة 3d . احسب مقدار التأثرية المغناطيسية عند درجة حرارة 300 كلفن لملح يحتوي على غرام – مول من ايونات الـكروم Cr^{2+} .

9 - 5 اذا علمت ان أيون الديسبروسيوم D_Y^{3+} يمتلك تسعة الـكترونات فـي القشرة 4f . اوجد قيمة J, S, L لهذا الايون ثم احسب التأثريـة المغناطيسية عند درجة حرارة 4 كيلفن لملح يحتوي على غرام – مول من ايونات الديسبروسيوم D_Y^{3+}

9 - 6 اذا علمت ان غاز بارامغناطيسي يحتوي على N من الذرات في كل 1 سم³ وان $S = 1/2 , L = 0$. احسب (أ) عدد الذرات في المستويين 2,1 عند درجة حرارة T وبوجود مجال مغناطيسي فيضه B . (ب) مقدار تمغنط الغاز البارامغناطيسي (ج) تعداد (population) المستويين عند درجة حرارة 300 كيلفن و 4 كيلفن . اذا علمت ان N تساوي 10^{22} لـكل سم³ و B تساوي 25 كيلوكاوس .

7 - 9 اشتق العلاقة التي تربط بين المجال الداخلي B_i ودرجة حرارة كوري T_C للمواد الفيرومغناطيسية . جد قيمة B_i لمادة الحديد ، اذا علمت ان درجة حرارة كوري للحديد تساوي 1043 كيلفن وان العزم المغناطيسي الفعلي لـكل ايون يساوي 2.2 مغنيط بور.

8 - 9 اذا علمت ان درجة حرارة كوري لاوكسيد البروبيوم EuO تساوي 70 كيلفن . استخدم نموذج « المجال الداخلي » لحساب النسبة بين التمغنط M عند درجة حرارة 300 كيلفن وبموجود مجال مقداره 10^{-2} تسلا والتمغنط M_{sat} عند درجة الصفر المطلق . علماً ان $g = 2, J = 7/2$ لأيون البروبيوم Eu^{+3}

الفصل العاشر

الخواص البصرية للمواد الصلبة

1 - 10 المقدمة : -

عند اضاءة المواد باسقاط الضوء عليها فان عدداً من العمليات يمكن ان تحدث بسبب التفاعل الذي يحدث بين الضوء الساقط وهذه المواد . ذلك ان جزءاً من هذا الضوء سوف يفقد ويتحول الى حرارة ، اي يمتص (absorbed) اما البعض الاخر فسوف يمر بدون فقدان اي ينفذ (transmitted) والقسم الاخر يتشتت (scattered) من سطح المادة اي ينعكس (reflected)

ان التفاعل الاساس الذي يؤدي الى ظهور الخواص البصرية للمواد ، هو الذي يحدث بين المجال المرافق للاشعة الكهرومغناطيسية (وعلى وجه الخصوص متجه المجال الكهربائي) والشحنات التي تحتويها هذه المواد . هذه هي العملية الرئيسية الا ان صيغة التفاعل الحقيقية تعتمد كثيراً على طبيعة الشحنات وطريقة توزيعها : اي فيما اذا كانت الكترونية او ايونية اوفيما اذا كانت حرة كما في الفلزات اومقيدة كما في اشباه الموصلات والعوازل .

مما تقدم يتضح لنا انه يلزم لكي نتعرف على الاسباب الكامنة وراء الخواص البصرية للمواد ، ان نتعرف ليس فقط على كيفية توزيع الشحنات في المواد وانما يلزمنا ايضا التعرف على ماهية الضوء .

لاتوجد هناك طريقة وحيدة لتمثيل الضوء بحيث نستطيع من خلالها الوصول الى التفسير الصحيح للخواص البصرية المراد دراستها وبالتالي فاننا نجد اننا ملزمون بالاخذ بالصفة الثنائية لضوء . ففي حالة النفاذ والانتقال خلال المواد الشفافة فان العامل الاكثر اهمية للتعرف عليه هو الطول الموجي اي اننا نتعامل مع الضوء على اساس انه موجات كهرومغناطيسية مستعرضة بطول موجي λ وسرعة c . من جهة اخرى وفي حالة الامتصاص فانه من الضروري تبني المفهوم الكمي للضوء اي نتعامل مع الضوء على اساس انه يتكون من جسيمات منفردة : فوتونات يمتلك كل منها مقدارا من الطاقة مساويا لـ

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \qquad \dots (10-1)$$

حيث يمثل ν تردد الضوء ,h ثابت بلانك .

2 - 10 معامل الانكسار

ذكرنا تواً ان الشحنات المختلفة والتي تدخل ضمن تركيب المادة الصلبة ، سوف تستجيب بعض الشيء للاشعة الكهرومغناطيسية الساقطة وان المتجه الكهربائي لهذه الاشعة سوف يزيح قليلا الشحنات من موقعها الاصلي مولدة بذلك ثنائي قطب (ذرة في مجال كهربائي تعاني استقطابا كهربائيا ذلك لان الالكترونات السالبة والنواة الموجبة تتأثران بقوى صغيرة نسبيا ولكن باتجاهين متعاكسين ونتيجة لهذا تتحور الذرة مكونة بذلك ثنائي قطب كهربائي) . ان الالكترونات المرتبطة بقوة الى ذراتها والتي تشكل قلب الايونات ، سوف يكون استقطابها ضعيفا بينما تكون مساهمة الالكترونات الحرة والمرتبطة بشكل ضعيف الى الذرات ، في الاستقطاب النهائي اكبر بكثير من غيرها .

اذا كان المجال الكهربائي المتناوب والتابع للموجة الكهرومغناطيسية ذا تردد ν فان الاستقطاب الكهربائي للذرة سوف يتذبذب هو الآخر ، بنفس التردد ν وبالتالي فان جزءاً من طاقة الموجة الكهرومغناطيسية الساقطة سوف تتحول الى طاقة اهتزازية

لثنائي القطب الـكهربائي المتولد وبذلك تنقص سعة الموجة الساقطة . ان ثنائي القطب المهتز سوف يبعث بدوره اشعة كهرومغناطيسية بنفس التردد v في جميع الاتجاهات ماعدا اتجاه محور الاستقطاب، عندما تتعرض مجموعة ذرات لموجة كهرومغناطيسية مستوية ولـكن غيرمستقطبة نجد ان الاشعة الثانوية تنبعث بصورة متناظرة (isotropic) في جميع الاتجاهات ذلك لان تأثير الذرات المختلفة هوعشوائي ووفق اصطلاحات علم البصريات تكون الموجات الثانوية ذات جبهات كروية (spherical front) بدلا من جبهات مستوية للموجات الساقطة ولذلك فان عملية التشتت هذه تتضمن امتصاص موجات مستوية ساقطة ثم اعادة اشعاعها على شكل موجات كروية بنفس التـردد) .

على الرغم من ان الثنائيات القطبية المحتثة سوف تكون متذبذبة بفعـل المجـال الـكهربائي المتذبذب كما ذكرنا اعلاه ، الا انه يجب التذكر ان الايونات ولكونها ثقيلة فانها لاتستطيع ان تجاري المجال المتذبذب الا عند الترددات التي تقع دون ترددآت الاشعة تحت الحمراء ومن ثم فان مساهمة الايونات في الاستقطاب الـكلي يكون ضعيفا في المنطقة المرئية (Visible region) من جهـة اخرى تستطيـع الالـكترونات الاستجابة بصورة جيدة مع المجال حتى عند الترددات فوق البنفسجية ultra-violet من الطيف المرئي .

وعلى فرض ان الفقدان في الطاقة بسبب تذبذب الثنائيات القطبية (الاحتكاك) هو قليل او بكلمة اخرى ان تفاعل الاشعة الـكهرومغناطيسية مع الشحنات لايسبب اي فقدان في الطاقة ولـكن يسبب من حالة اعادة الاشعاع فان المادة سوف تظهر شفافية (transparency) لهذه الاشعة الا ان فعل التأخير الحاصل في اعادة الاشعاع سوف يقلل من السرعة الفاعلة للضوء ومن ثم فانه يقال عندئذ ان المادة تمتلك معامل انكسار (retractive index) (n) اي ان

$$n = \frac{c}{v} \qquad \dots (10-2)$$

حيث c سرعة الضوء في الفراغ ,v سرعة الضوء في المادة .

مما تقدم اعلاه يتضح لنا ان الاستقطاب فـي المادة بفعـل سقـوط الاشعـة الـكهرومغناطيسية عليها يكون مقياساً لمعامل الانكسار لهذه المادة فكلما كـان الاستقطاب كبيركان فعل التأخير اكبر وكلما كانت سرعة الضوء في المادة اصغركان معامل

الانكسار اكبر (المعادلة 2 – 10) . هذا وتشير النظرية الـــكهرومغناطيسية للضوء الى ان

$$n = (\epsilon_r)^{\frac{1}{2}} \quad \dots (10-3)$$

للمواد غير المغناطيسية (non-magnetic materials)
المعادلة (3 – 10) يمكن اعادة كتابتها بالصيغة

$$\epsilon_r = n^2 \quad \dots (10-4)$$

وبالتالي فان معادلة كلاوس – موستا (المعادلة (66 – 8) في الفصل (8) والخاصة بالعوازل ، سوف تتحول الى

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0} \Sigma n_i \alpha_i \quad \dots (10-5)$$

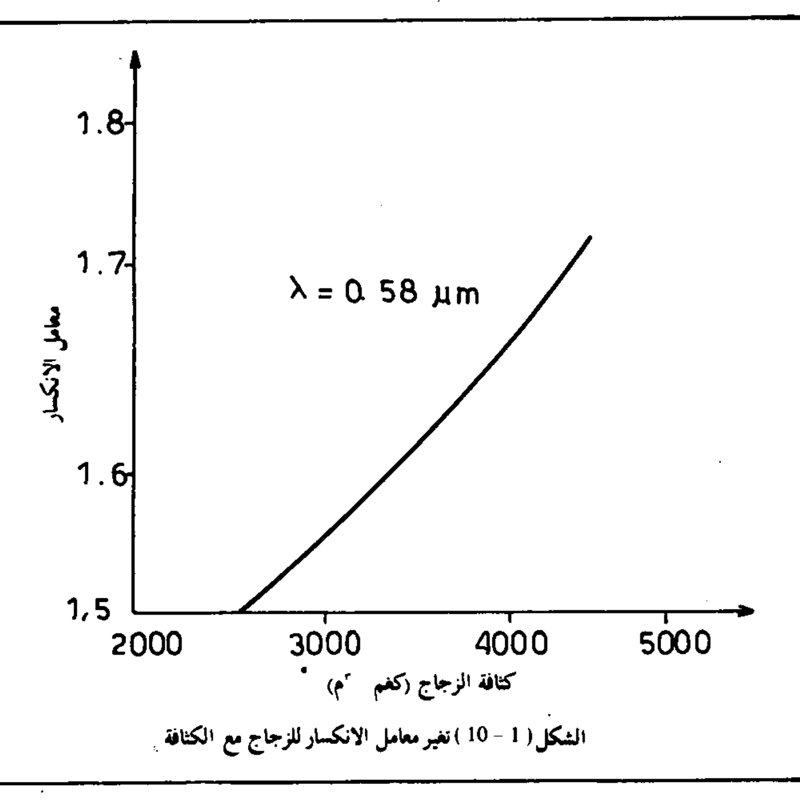
تدعى المعادلة (5 – 10) بمعادلة لورنز – لورنتز (Lorenz - Lorentz)
عندما تكون n مساوية للواحد فان $n^2 + 2 = 3$ وبهذا فان المعادلة (5 – 10) تتحول الى :

$$n^2 = \epsilon_r = 1 + \frac{1}{\epsilon_0} \Sigma n_i \alpha_i \quad \dots (10-6)$$

عندما تكون $\alpha = 0$ اي عندما لاتمتلك المادة اي استقطابية ، فان المعـــادلـة (6 – 10) سوف تتحول الى

$$n^2 = \epsilon_r = 1 \quad \dots (10-7)$$

يتضح من المعادلة (7 – 10) ان المادة التي لاتمتلك اي استقطابية لاتمتلك اي تأخير في اعادة اشعاع الضوء وبالتالي فان معامل انكسارها يكون مساويا لـ 1 وبالتالي فانه يمكن القول انه كلما كانت كثافة الثنائيات القطبية في المادة اكبر كلما كانت ϵ_r اكبر ومن ثم تزداد قيمة n . ففي الذرات ذات العدد الذري الاكبر تكون كثافة الالكترونات كبيـرة ومن ثم فانه من المتوقع ان تمتلك معامل انكسار اكبر ويبين الشكل 1 - 10 تغير معامـــل الانكسار مع تغير الكثافة لمادة الزجاج



الشكل (1 - 10) تغير معامل الانكسار للزجاج مع الكثافة

3 - 10 الانكسار المزدوج

قبل ان نتكلم عن الانكسار المزدوج (Birefringence) او الانكسار المضاعف (double refraction) يحسن بنا التعرف على بعض من المصطلحات التي سوف ترد في هذا البند ومنها

1 - 3 - 10 المحور البصري . فيما عدا البلورات المكعبة فان جميع البلورات تكون غير متماثلة وتختلف خصائصها الفيزيائية باختلاف الاتجاه ضمن البلورة . ان الكلسايت (بلورات ثالث كاربونات الكالسيوم) والكوارتز (بلورات ثاني اوكسيد السليكون SiO_2) ينتميان لنوع من البلورات تدعى بالبلورات الاحادية المحور (uniaxial) .في هذا النوع من البلورات يوجد اتجاه خاص يدعى بالمحور البصري (optic axis) وهو في الواقع محور تناظر بالنسبة للبلورة ولترتيب الذرات فيها فاذا قمنا بقياس اية خاصية فيزيائية كالتوصيلية الحرارية مثلا فاننا سوف نجد انها متساوية اذا قيست باتجاهات عمودية على المحور البصري وتتغير بتغير الزاوية لتصل الى نهاية عظمى او صغرى على طول المحور .

2 - 3 - 10 الانكسار المزدوج

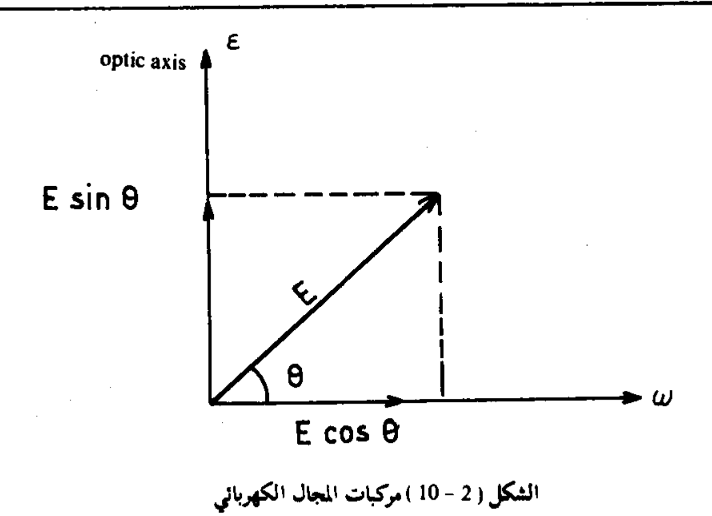
من المعروف ان المتجه الكهربائي للاشعاع الكهرومغناطيسي يكون عموديا عـلى اتجاه انتشار الموجة ومن ثم فان الازاحة الكهربائية والثنائيات القطبية الناتجة هي الاخرى تكون عمودية على اتجاه الانتشار.

عند دراسةخواص البلورات فانه من الضروري استخدام ضوء مستقطب استوائيا (Plane-Polarized) أي ذلك الضوء الذي يكون مجاله الكهربائي متغيرا ومقتصرا في حركته على مستوى واحد يحتوي اتجاه انتشار.يدعى اتجاه الاستقطاب عادة باتجاه الاهتزاز للضوء .

فعندما يقطع شعاع مستقطب استوائيا بلورة احادية المحور بصورة موازيةللمحور البصري فان معامل الانكسار يكون واحدا لهذا الشعاع في جميع اجزاء البلورة ويعرف عادة بـ بالحرف اللاتيني ω ومن جهة اخرى اذا كان الشعاع المستقطب استوائيا ويقطع البلورة بصورة عمودية على المحور البصري فان معامل الانكسار سوف يعتمد على اتجاه الاهتزاز للمجال الكهربائي للشعاع المستقطب : فاذا كـان اتجاه الاهتزاز عموديا على المحور البصري هو الاخر فان معامل الانكسار يكون كالسابق ويعرف كذلك بـ ω اما في حالة كون الاهتزاز موازيا للمحور البصري فان معامل الانكسار سيكون مختلفا عن السابق ويعرف بـ ε . الحالة الاخيرة هي عندما يكون اتجاه الاهتزاز واقعا بين الاتجاهين (العمودي على المحور البصري والموازي له) فان الشعاع سوف ينشطر الى مركبتين ويكون المجال الكهربائي التابع لهما موازيا وعموديا على المحور البصري – انظر الشكل (2 – 10) حيث تكون المركبة الموازية لاتجاه المحور البصري مساوية لـ $E\sin\theta$ بينما تكون العمودية غليه مساوية لـ $E\cos\theta$

تدعى معاملات الانكسار ω و ε بالمعامل الاساسية للانكسار (principle indices) وعندما تكون $\omega < \varepsilon$ فان البلورة تدعى بالبلورة الاحادية المحور الموجب (positive uniaxial) اما اذا كانت $\varepsilon < \omega$ فان البلورة تعرف بالبلورة الأحادية المحور السالب (negative oniaxial)

من الشكل (2 – 10) يمكن الاستنتاج بان سرعة الانتشار لكلا المركبتين مختلفة ومن ثم فان هاتين المركبتين سوف تنفذان من البلورة بفرق طور تعتمد قيمته ليس فقط على السرعة النسبية للانتشار (معامل الانكسار) وانما ايضا على سمك البلورة .



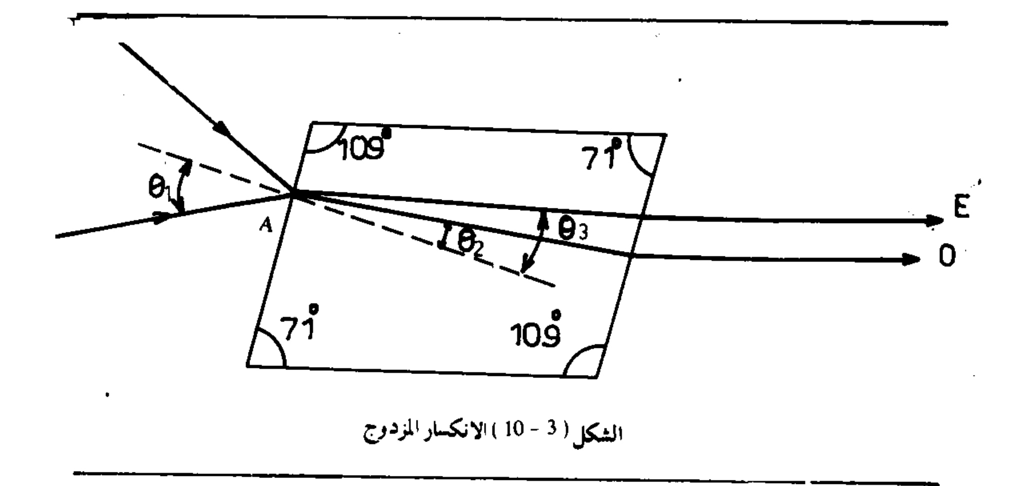
الشكل (2 - 10) مركبات المجال الكهربائي

لنفرض ان الشعاع الساقط ليس موازيا اوعموديا على المحور الضوئي – انظر الشعاع الساقط عند النقطة A بالاتجاه العمودي لبلورة الكالسيت المعينية (rhombohedron) في الشكل 3 – 10 وعليه فان هذا الشعاع الساقط سوف ينشطر الى شعاعين . هذه الظاهرة تدعى بالانكسار المضاعف (double refraction) ويعرف الشعاع الاول بالشعاع العادي (الشعاع O في الشكل 3 – 10 ويقع عادة في مستوى المحور البصري ويقطع هذا الشعاع البلورة دون انكسار طبقا لقانون سنيل (Snell's law) بحيث ان

$$\frac{\sin\theta_1}{\sin\theta_2} = n \qquad \ldots (10-8)$$

اما الشعاع الثاني من الانكسار فيعاني من الانكسار ولا يحقق قانون سنيل . هذا الشعاع يدعى بالشعاع الغريب او الفوق عادي (الشعاع E في الشكل 3 – 10) ويقع في المستوى العمودي على المحور البصري . ان السرع النسبية للشعاعين يمكن تحديدهما بواسطة معامل الانكسار وان الفرق بين عاملي الانكسار هو مقياس للانكسار المضاعف في البلورة

واخيرا لابد لنا من الاشارة الى ان البلورات ذات الانكسار المزدوج تنقسم الى بلورات احادية المحور وبلورات ثنائية المحور (تمتلك البلورات ذات النظام المتعامد الاوجه والبلورات الاحادية الميل وثلاثية الميل ، محورين بصرين وتدعى بالبلورات الثنائية المحور ومن ثم فانها تمتلك ثلاثة اتجاهات اهتزازية وثلاثة معامل انكسار تعرف بـ α, β, γ)



الشكل (3 - 10) الانكسار المزدوج

في البلورات الاحادية المحور تكون معاملات الانكسار ومن ثم السرعة بالاتجاهات E, O متساوية في اتجاه واحد هو ما يسمى بالمحور الضوئي . ومن جهة اخرى يوجد في البلورات الثنائية المحور اتجاهان لا تتوقف فيهما سرعة الامواج المستوية على اتجاه الاهتزازات الساقطة ويصنع هذان المحوران الضوئيان احدهما مع الاخر زاوية معينة تكون خاصة بالبلورة وتتوقف الى حد ما على الطول الموجي للشعاع ويمكن النظر الى البلورات احادية المحور كحالة خاصة للبلورات الثنائية المحور حيث تنعدم فيها الزاوية بين المحورين .

4 - 10 الامتصاص

ينتج طيف الامتصاص من ظاهرة الفقدان في الطاقة الناتجة عن التفاعل الحاصل بين الضوء والشحنات التي تحتويها المادة . ان عمليات الامتصاص تكون عادة على ثلاثة انواع وليس من الضروري حدوثها في وقت واحد وفي كل مادة . ان حدوث اي نوع من الامتصاص يعتمد على التفاعل بين الضوء الساقط ونوع الشحنات المشاركة في هذا التفاعل . ويوجد عادة ثلاثة انواع من الشحنات التي تشارك في التفاعل وهي :

a- الكترونات القشرة الداخلية لايونات الشبيكة ، المرتبطة بقوة الى هذه الايونات

b- الكترونات القشرة الخارجية السائبة

c- الكترونات التوصيل الحرة في المعادن او اشباه الموصلات

ان النوع الاول من الامتصاص يؤدي الى عملية التبدد البصري (optical dispersion) ويتم حدوثه عند الترددات الرنينية اي عندما يتساوى تردد الضوء الساقط مع التردد الطبيعي للالكترون او الايون اما بالنسبة للنوع الثاني فان هذا الامتصاص يحدث بواسطة الالكترونات ويعمل على تهيجها : اي نقلها من مستويات الطاقة المملوءة نسبيا الى المستويات الفارغة نسبيا . فاذ اكان الفرق في الطاقة بين المستويين هو ΔE فان الامتصاص سوف يحدث اذا كانت طاقة الفوتون مساوية ايضا لـ ΔE بحيث ان

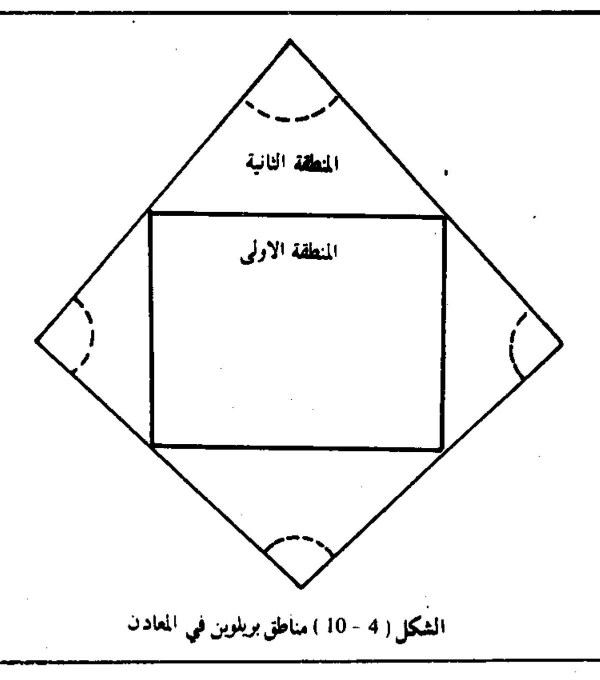
$$\nu = \frac{\Delta E}{h} \qquad \ldots (10 - 9)$$

هذا النوع من الامتصاص يعتبر اساسيا ويتميز بطيفه العريض وذلك لان عرض حزم الطاقة وتعدد المستويات سوف يعطي عدداً كبيراً من الخيارات . ان اهم الانتقالات بالنسبة للمواد شبه الموصلة والعازلة هي تلك التي تحدث بين حزم التكافؤ والتوصيل .

من المعروف ان كل مادة من هذه المواد تتميز بفجوة طاقة E_g وعليه فان اقل طاقة لازمة للفوتون كي تؤدي الى حدوث الامتصاص ثم التهيج يجب ان تساوي E_g وبذلك فان

$$\lambda = \frac{hc}{Eg} \qquad \ldots (10 - 10)$$

وبالنسبة للالكترونات الحرة فان امتصاص الطاقة بواسطة هذه الالكترونات يكون مشابها الى الاصطدام مع متذبذب حر وبذلك يتبع النظريات التقليدية ومن ثم فان الالكترون الحر بامتصاصه للطاقة سوف ينتقل من حالة كمية الى حالة كمية اخرى مسموحة . وطبقا لميكانيك الكم فان هذه الانتقالات تكون مسموحة اذا كانت واقعة في مناطق اوحزم مختلفة . او بكلمة اخرى ان الانتقال يظهر بين المنطقتين فقط اذا كان المتجه الموجي k في كلا المنطقتين يمتلكان الاتجاه نفسه بحيث ان الزخم يبقى محفوظا اثناء الانتقال . افرض ان سطح فيرمي في منطقة بريلوين الاولى يبدو كما في الشكل 4 - 10 وان الحالات المطابقة لهذا السطح في منطقة بريلوين الثانية تقع عند الاقواس المنقطة اضف الى ذلك ان الانتقالات المتشابهة هي ممكنة ايضا بين الحالات المشغولة في المنطقة الاولى والحالات المناظرة في المنطقة الثانية . ان الذي يحدث هنا لا يختلف كثيراً عما يحدث في الظاهرة الكهروضوئية الا ان الالكترون في هذه الحالة لا يغادر البلورة ومن ثم فانها تدعى بالظاهرة الكهروضوئية الداخلية (internal photoelectoic effect) .



الشكل (4 - 10) مناطق بريلوين في المعادن

لنفرض ان طاقة الحالة هي

$$E = \frac{h^2 k^2}{8\pi^2 m} \qquad \dots (10 - 11)$$

وكذلك على فرض ان المنطقة الاولى متاخمة للمنطقة الثانية بحيث ان الطاقة تبقى مستمرة – حسب انموذج الالكترون الحر – لذا فان الطاقة الدنيا اللازمة للانتقال ستكون مساوية لـ

$$h\nu_{min} = \frac{[(2K_{hkl} - k_0)^2 - k_0^2]}{8\pi^2 m} \qquad \dots (10 - 12)$$

حيث k هو العدد الموجي للحالة عند سطح فيرمي .. k_{hkl} هو العدد الموجي لمنطقة بريلوين الاولى عند الحدود .

لابد لنا هنا من التنويه الى ان تواجد الالكترون الحريكون غالبا في المعادن وبالتالي فان هذا النوع من الامتصاص (الثالث) يكون خاصا الى حد كبير بهذه المواد في حين انه لا يعتبر اساسياً في المواد الشبه الموصلة على الرغم من امكانية حدوثه .

ان اكثر عمليات الامتصاص اهمية في اشباه الموصلات ، هي تلك التي تؤدي الى أنتقال الالكترون من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل وبسبب من اهمية هذه العملية فانها تدعى عادة بعملية لامتصاص الاساسية . في هذه العملية يقوم الالكترون بامتصاص فوتون (من الحزمة الساقطة) ويقفز من حزمة التكافؤ الى حزمة التوصيل . وكما ذكرنا فان تردد الفوتون الساقط يجب ان يكون مساويا لـ(Eg / h) لكي يحدث الامتصاص .

في عملية الامتصاص هذه تكون الطاقة الكلية محفوظة والزخم الكلي كذلك . اي ان

$$E_f = E_i + h\nu \qquad \ldots (10-13)$$

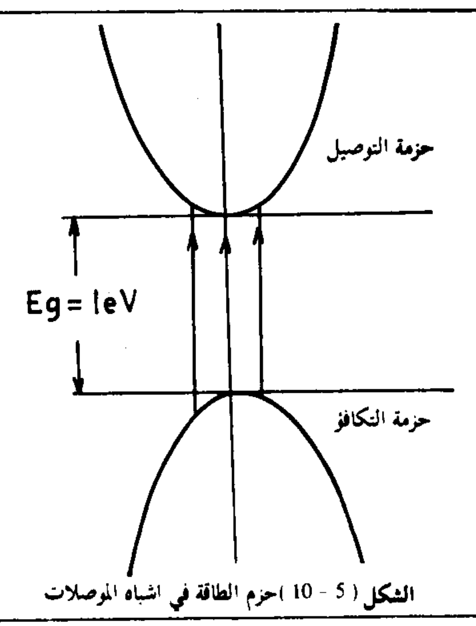
و

$$k_f = k_i + q \qquad \ldots (10-14)$$

حيث تمثل E_f , E_i طاقة الالكترون الابتدائية والنهائية في حزمتي التكافؤ والتوصيل على التوالي . كذلك تمثل k_i و k_f زخم الالكترون في كلا الحزمتين . والمتجه q هو المتجه الموجي للفونون الممتص وعادة مايكون صغيرا بحيث يمكن اهماله اي ان

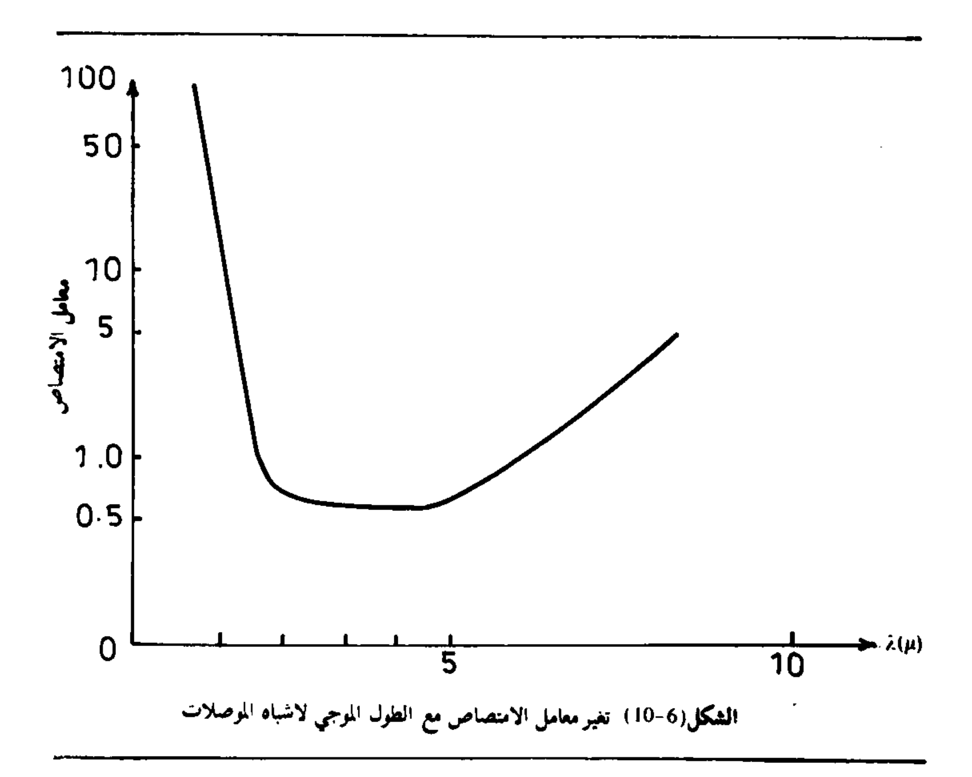
$$k_f = k_i \qquad \ldots (10-15)$$

بمعنى ان الزخم محفوظ . ان قاعدة الاختيار هذه تشير الى ان الانتقال بين حزمتي التكافؤ والتوصيل لا يحدث في فضاء k الا عموديا فقط . اي لا يحدث بصورة مائلة مثلا – انظر الشكل (5 - 10)



الشكل (5 - 10)حزم الطاقة في اشباه الموصلات

تكون فجوة الطاقة في اشباه الموصلات صغيرة عادة – في حدود واحد الكترون فولت او اقل –ومن ثم فان اشباه الموصلات تكون شفافة الى حد كبير ، للاشعاعات ذات الاطوال الموجية القصيرة ، اما عند الطول الموجي 2 ما يكرون فان معامل الامتصاص يبدا بالزيادة ويستمر حتى 1.7 ما يكرون تقريبا . عندها يكون معامل الامتصاص قد وصل الى اقصى قيمة له – انظر الشكل (6 - 10) – متفقا بذلك مع مضمون المعادلة (10 - 10) ذلك ان الطول الموجي 1.7 ما يكرون يكافيء 1.15×10^{-19} جول او 0.72 الكترون –فولت والتي تساوي عرض فجوة الطاقة في الجرمانيوم .

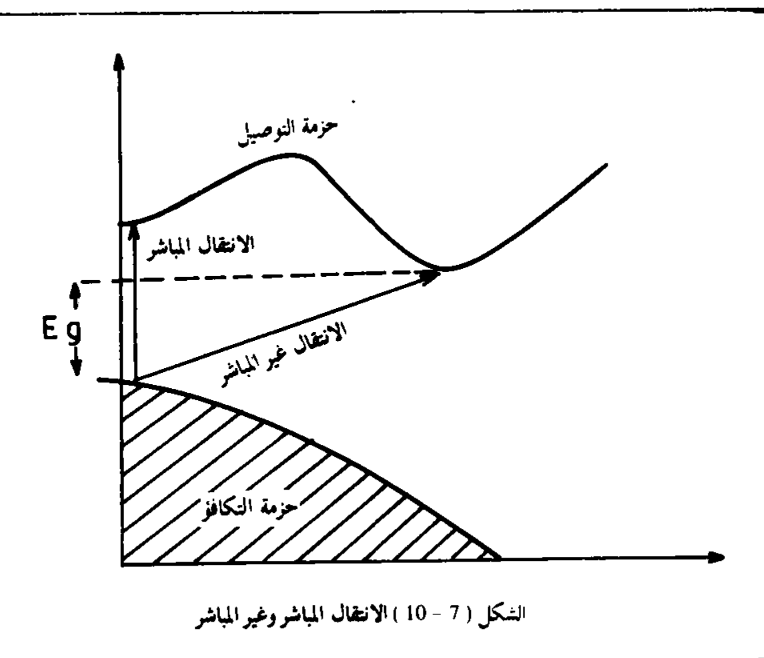


الشكل(6-10) تغير معامل الامتصاص مع الطول الموجي لاشباه الموصلات

على الرغم مما جاء اعلاه فان حافة الامتصاص لاشباه الموصلات تعتمد بشكل كبير على نوعية شبه الموصل ولا تظهر بالضرورة عند القيمة المكافئة لفجوة الطاقة E_g ان السبب الكامن وراء ذلك يعود الى حقيقة ان قمة حزمة التكافؤ في بعض الموصلات ، لا تقع بشكل مباشر تحت منخفض حزمة التوصيل –انظر الشكل (7 - 10) وبالتالي فان لدينا نوعين من الانتقال بين حزم اشباه الموصلات :–

a- الانتقال المباشر (direct-transition)

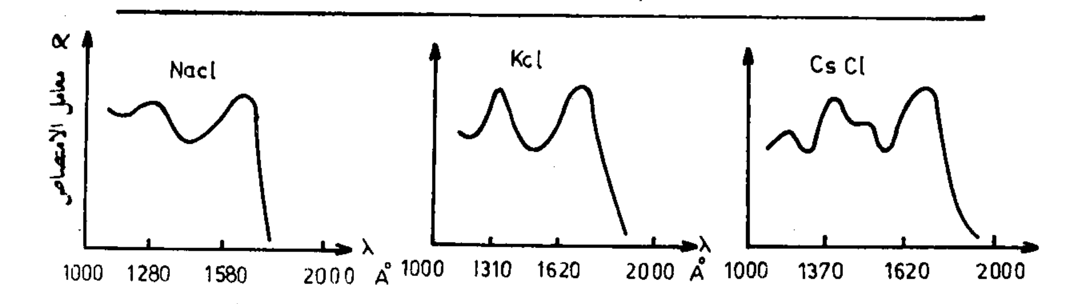
b- الانتقال غير المباشر (indirect-transition)



الشكل (7 - 10) الانتقال المباشر وغير المباشر

ومن جهة اخرى تمتلك العوازل فجوة طاقة كبيرة وتكون الخواص البصرية لها مشابهة للخواص البصرية لاشباه الموصلات عند المنطقة تحت الحمراء من طيف الاشعة الكهرومغناطيسية وتكون شفافة للضوء المرئي ويبين الشكل (8 - 10) تغير معامل الامتصاص لبعض العوازل كدالة للطول الموجي . يلاحظ في هذه المنحنيات ان الامتصاص يظهر في المنطقة فوق البنفسجية (عند الطاقات العالية) كذلك يلاحظ وجود ذرى (peaks) في هذه المنحنيات مما يشير الى ان عملية الامتصاص هذه لا تعود فقط الى الاستقطابية وانما هي اكثر تعقيدا من ذلك .

ان اول من عالج وشرح الية الامتصاص في القواعد القلوية هو فرانكل (Frenkel) في عام 1931 حيث اشار الى ان امتصاص الفوتون يؤدي الى توليد زوج الكترون – فجوة . ان الالكترون المتولد على اية حال . سوف لن ينتقل الى حزمة التوصيل والا لكان هناك امكانية حدوث ظاهرة التوصيلية الكهربائية وانما يبقى



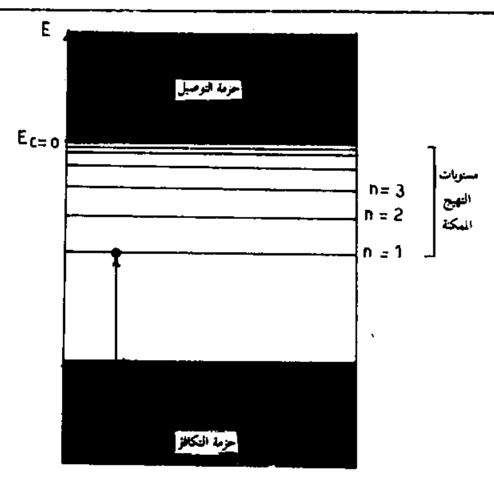
الشكل (8 - 10) تغير معامل الامتصاص مع الطول الموجي لبعض العوازل

قريبا من الفجوة . ومثل هذا الزوج (الكترون –فجوة) يدعى بالاكزيتون (exciton) ان طاقة الترابط لمثل هذا الزوج الكترون – فجوة تكون مساوية لـ

$$E_n = - \frac{m_0^* e^4}{8\varepsilon_f^2 \epsilon_0^2 h^2 n^2} \qquad \ldots (10 - 16)$$

حيث ان $m_0^* = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$ وان ϵ_0 تمثل ثابت العازل عند الترددات العالية والناتجة عن وجود الاستقطابية الالكترونية عند هذه الترددات .

عودا الى الشكل (8 - 10) فان ظهور الذيل في هذه المنحنيات يشير الى وجود الشوائب في البلورات بينما يكافيء ظهور الذرى ، مستويات الطاقة المبينة في الشكل (9 - 10) ، والتي تكون متقاربة بشكل اكبر كلما كان العازل اكبر .



الشكل (9 - 10) مستويات التهيج المحتملة للعوازل

5 - 10 الليزر

يعد الليزر (Lazer) من الناحية التاريخية ثمرة الميزر (Maser) الذي هو عبارة عن جهاز يستخدم الامواج الراديوية القصيرة جدا (الامواج الدقيقة) بدلا من امواج الضوء المرئي المستخدم في انتاج الليزر. ولقد بني اول ميزر بنجاح على يد ش .هـ. تاونز (Towens) بين عام 1951 وعام 1954.

في عام 1958 اعلن أ .هـ. شاولو (Schalow) وش . هـ. تاونز Townes اسس الميزر الضوئي او الليزر وفي عام 1960 قام ميمان (Maiman) ببناء اول ليزر بنجاح مستخدما تلك الاسس التي وضعها في عام 1958 .
ان مصطلح الليزر مشتق من الاحرف الاولى لعدة كلمات في اللغة الانكليزية وهي :
"Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation"
والتي تعني تضخيم الضوء بواسطة الانبعاث المحفز للاشعة .

ان لليزر خواصا لا يمكن ان تتوفر في اي مصدر ضوئي اخر : فهو عبارة عن حزمة من ضوء شديد مركز بالغ الترابط (Coherence) متوازية الى الحد الذي يجعل حزمة من ضوء ليزر مرئي قطرها 10 سم لا يزيد اتساعها عند سطح القمر – الذي يبعد عنا 384 الف كيلو متر – عن 5 كيلو متر .

1 - 5 - 10 الانبعاث الاني والمحفز :

من المعروف ان الانظمة الذرية – كالذرات والايونات والجزئيات – يمكن ان تتواجد في حالات مستقرة معينة يناظر كل منها قيمة محددة من الطاقة وتميز هذه الحالات بارقام كمية (quantum numbers) .اما قيم الطاقة العددية فتدعى بمستويات المنظومة الذرية . وفي حالة الذرات المعزولة توصف الحالات (states) بالارقام الكمية التي تميز المدارات (orbits) والبرم (spin) للالكترونات المتواجدة خارج الغلاف الالكتروني المغلق. اما في حالة الجزيئات فان وصف الحالة يتضمن الارقام الكمية المقترنة بالحركات الدورانية والاهتزازية للجزيئة اضافة الى الارقام الكمية التي تصف الحركات الالكترونية .

يطلق على مستوى المنظومة الذرية الذي يمتلك اقل طاقة بمستوى الحالة الدركية (ground level) بينما يدعى اي مستوى اخر بمستوى تهيج (excited level) ويجري عادة ترقيم المستويات مبتدئين بمستوى الدركي وحسب الزيادة في درجة طاقة المستوى .

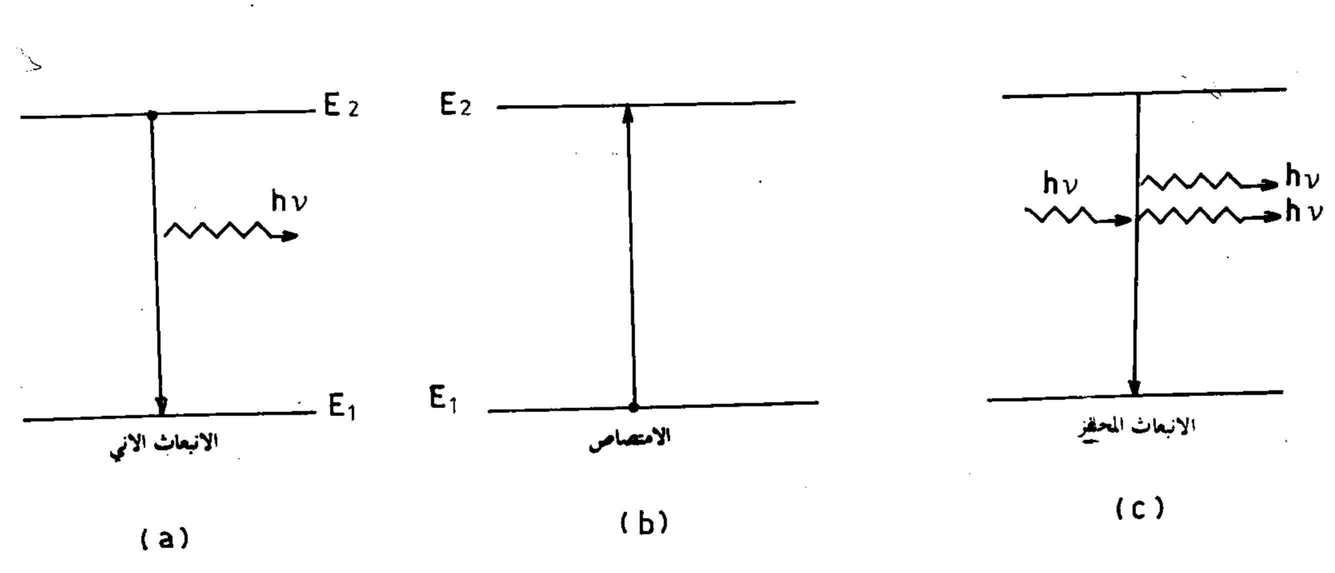
عندما تمتلك اثنتان او اكثر من الحالات مستوى الطاقة نفسها فان ذلك يدعى بمستوى منحل (degenerate) وتكون عدد الحالات التي تمتلك نفس الطاقة بمثابة حالة تضاعف المستوى multiplicity . ان جميع الحالات التي تمتلك الطاقة نفسها تعتبر متطابقة ويمكن ان تحدث الانتقالات بين الحالات المستقرة مصحوبة بانبعاث او امتصاص الطاقة على شكل اشعة او بانتقال الطاقة من او الى منظومة ذرية اخرى . واذا كان الانتقال اشعاعيا فان تردد الاشعة المنبعثة او الممتصة من قبل المنظومة تعطى وفقـا لعلاقة بور Bohr التالية

$$E_2 - E_1 = h\nu \qquad \dots (10 - 13)$$

حيث تمثل E_2, E_1 طاقتي الحالتين التي حدث بينهما الانتقال بينما يمثل h ثابت بلانك .

مما تقدم يتضح لنا انه اذا لم تكن المنظومة الذرية في المستوى الدركي فانه يمكن لهذه المنظومة ان تغير حالتها الى مستوى طاقة اوطأ مع بعث اشعة ومن دون اية مسببات خارجية وتدعى هذه الظاهرة بالانبعاث الاني – انظر الشكل (10a - 10) كما تدعى الاحتمالية لكي تغير الذرة الموجودة في المستوي n حالتها انيا الى المستوى الادنى m في فترة وحدة الزمن باحتمالية الانتقال الاني وتعرف بـ A_{nm} . فاذا كان هناك عدد كبير من المنظومات الذرية وكان N_n يمثل عدد المنظومات المتواجدة في المستوي n فسيكون العدد الكلي للانتقالات التي تحدث في الثانية الواحدة من المستوى n الى المستوى m يساوي $N_n A_{nm}$ ويكون انبعاث الاشعة الانية من ذرات المنظومة بطور عشوائي وبالتالي فان هذا التجمع من المنظومة الذرية يمثل مصدرا ضوئيا غير مترابط (non coherent)

ويوجد نوع من الانتقالات فيما بين مستويات الطاقة الذرية او الجزيئية . لاتحدث بصورة انية وانما تحدث عن طريق التحفيز (stimulation) بواسطة اشعة كهرومغناطيسية ذات تردد مناسب (عندما تكون طاقة الفوتون الساقط مساوية بالضبط لفرق الطاقة بين



الشكل (10 - 10) الانبعاث الاني والمحفز والامتصاص عند سقوط الفوتونات

المستويين تكون احتمالية تغير حالة المنظومة الذرية خلال وحدة الزمن من المستوى n الى المستوى m – انظر الشكل (10b - 10) – هي

$$P_{nm} = A_{nm} + \mu B_{nm} \qquad \dots (10 - 17)$$

حيث تمثل μ الكثافة الاشعاعية عند التردد الذي يعود الى فرق الطاقة بين المستويين و A_{nm} ، B_{nm} هما ثوابت تحددها المنظومة نفسها .

بالاضافة الى ما ذكر اعلاه فان وجود الاشعة ذات التردد الملائم سوف يعمل ايضا على نقل المنظومة الذرية من مستوى طاقة منخفض الى مستوى طاقة اعلى وتكون احتمالية حصول الامتصاص هي :

$$P_{mn} = \mu B_{mn} \qquad \dots (10 - 18)$$

مما تقدم يتبين لنا ان الاشعة المنبعثة من منظومة ذرية معرضة لمجال اشعاعي خارجي تكون على نوعين : الاول تتناسب شدته طرديا مع A_{nm} وهي الاشعة الانية ويكون طورها غير معتمد على طور الاشعة الخارجية والنوع الثاني : وهو الجزء الذي تتناسب شدته طرديا مع μB_{nm} ويدعى بالاشعة المحفزة (المستثارة) التي يكون طورها هو طور الاشعة الخارجية .

10 – 5 – 2 علاقتا اينشتاين

ان احتمالية انتقال الذرة من مستوى طاقة اعلى (n) الى مستوى طاقة اوطا (m) (اشعاع) ، تكون مساوية لـ $A_{nm} + \mu B_{nm}$ بينما تكون احتمالية انتقال الذرة من المستوى (m) الى المستوى (n) (امتصاص)، مساوية لـ μB_{mn} .

افترضنا ان لدينا منظومة ذرية تحتوي على المستويات 1 ,2 ,3 , ... ذات الطاقات E_1, E_2, E_3 ... وهكذا على التوالي فان عدد الذرات لكل وحدة حجم الموجودة في هذه المستويات هي N_1, N_2, N_3 ... تكون – حسب قانون التوزيع لبولتزمان – مساوية لـ .

$$N_1 = A\, e^{-E_1 / K_B T} \qquad \dots (10\text{-}19A)$$

و

$$N_2 = A\, e^{-E_2/K_B T} \qquad (10-19B)$$

او ان

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{(-(E_2 - E_1)/K_B T)} \qquad \ldots (10-20)$$

فاذا كان $E_2 > E_1$ فان $N_1 > N_2$

طبقا لما جاء اعلاه فان عدد الانتقالات ى n الى المستوى m

$N_2 P_{nm}$ او ان

$$, = N_2 A_{nm} + N_2 \mu B_{nm} \qquad \ldots (10-21)$$

كذلك فان عدد الانتقالات من المستوى m الى المستوى n سيكون مساويا لـ

او ان

$$N_1 P_{mn} = N_1 \mu B_{mn} \qquad \ldots (10-22)$$

لكي تكون المنظومة الذرية في حالة توازن حراري فانه يجب ان تتحقق العلاقة الحالية :

$$N_m P_{mn} = N_n P_{nm} \qquad \ldots (10-23)$$

او ان

$$N_m B_{mn} \mu = N_n \{ A_{nm} + B_{nm} \mu \} \qquad \ldots (10-24)$$

وبحل المعادلة الاخيرة نجد ان

$$\mu = \frac{A_{nm} / B_{nm}}{\left(\frac{N_m}{N_n} \right) \left(\frac{B_{mn}}{B_{nm}} \right) - 1} \qquad \ldots (10-25)$$

الا انه وفقا لاحصاء بولتزمان نجد ان نسبة عدد الذرات في المستوي m الى عددها في المستوى n تكون مساوية لـ

$$\frac{N_m}{N_n} = e^{(E_n - E_m)/K_B T} = e^{h\nu/K_B T} \qquad \ldots (10-26)$$

حيث ان $E_n - E_m = h\nu$ وبذلك فان

$$\mu = \frac{A_{nm} / B_{nm}}{\left(\frac{B_{mn}}{B_{nm}} \right) e^{h\nu/K_B T} - 1} \qquad \ldots (10-27)$$

هذه المعادلة تعطي كثافة الفوتونات ذات التردد ν وفي حالة التوازن الحراري لدينـــا من علاقة بلانك للاشعاع الحراري ان

$$\mu(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \quad \frac{\nu^3}{e^{h\nu/K_B T} - 1} \qquad \ldots (10-28)$$

وعند التعويض عن μ من (المعادلة (26) في المعادلة (27) نحصل على

$$B_{nm} = B_{mn} \qquad \ldots (10-29)$$

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \qquad \ldots (10-30)$$

ان اول من قام باستنتاج هاتين العلاقتين هو انشتاين عام (1917) ولذلك عرفتا باسمه وتشير هاتان العلاقتان الى امكانية حدوث الانبعاث المحفز بالاشعاع وان معامـــل الانتقال بين حالتين هو نفسه في حالتي الاشعاع والامتصاص (المعادلة (23 - 10) . كذلك فان المعادلة (25 - 10) توضح ان النسبة بين معدل الانبعاث الآني الى الانبعاث المحفز تحت شرط التوازن هي .

$$R = \frac{A_{nm}}{\mu B_{nm}} = \exp(h\nu/K_B T) - 1 \qquad \ldots (10-31)$$

فاذا كانت ν للون الاخضر هي 5×10^{14} هيرتز في درجة حرارة الغرفة فان $R = e^{82}$ ومنه يتبين بأن حدوث انبعاث محفز يكون مهملا بالنسبة لحدوث انبعاث اني . يلاحظ ان معدل الانبعاث الانـي يكون مساويا الى معدل الانتقال المحفز($R = 1$)عند الطول الموجي 60 مايكرون اي في المنطقة تحت الحمراء البعيدة . ومن هنا يتضح صعوبـــة احداث الانبعاث المحفز في المنطقة المرئية من الطيف مع افتراض وجود شرط التوازن الحراري ، لذلك فكر العلماء بوجوب احداث الانقلاب الاسكاني (التوزيع العكسي) (inverse population) الذي ينعدم فيه شرط التوازن الحراري وعندئذ يصبح الانبعاث المحفز في المنطقة المرئية ممكنا .

3 – 5 – 10 الانقلاب الاسكاني

على الرغم من اننا وجدنا ان الاحتمالية لامتصاص الاشعة تكون مساوية لاحتمالية حدوث الاشعاع المحفز الا انه في الاحوال الاعتيادية نجد ان $h\nu$ للذرات او الجزيئات التي هي في حالة توازن حراري اكبر من K_BT ومن ثم فان تعداد الذرات في مستويات الطاقة العالية يكون اصغر بكثير من تعدادها في مستويات الطاقة الواطئة . وبالنسبة لغاز الهيدروجين في درجة حرارة الغرفة تصبح العلاقة بين N_1 , N_2 بالصورة :

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left\{ - \left(\frac{-3.39 - (13.9)\,e}{K_B \times 293} \right) \right.$$

حيث عبرنا عن مستويات الطاقة بوحدة الالكترون فولت وعند درجة حرارة الغرفة 20 درجة مئوية تعادل 293 كيلفن وبما ان e تساوي 1.6×10^{-19} كولوم وثابت بولتزمان K_B يساوي 1.38×10^{-23} جول / كيلفن ، لذا فان المعادلة تصبح

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left\{ - \left(\frac{10.2 \times 1.6 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 293} \right) \right\}$$

$$= e^{-404} \qquad = 10^{-176}$$

هذا العدد صغير للغاية وهكذا يمكن القول بان اغلب ذرات الهيدروجين تعيش في الحالة الدركية للطاقة ولكن اذا كانت درجات الحرارة عالية (كحرارة جوالشمس 6000 كيلفن) فعندئذ ستكون نسبة عدد الذرات المتهيجة ذات اعتبار = $10^{-8.6}$ كذلك فان نسبة عدد الذرات المتهيجة سيكون كبيرا ايضا في درجة حرارة الغرفة عندما يكون الفرق بين مستويات الطاقة صغيرا جدا

افترض الان اننا سلطنا ضوءا تردده ν على نظام ذري فرق الطاقة بين حالته الدركية وحالته المتهيجة يساوي $h\nu$ نتيجة لكون الحالات العالية فارغة نسبيا يكون الانبعاث المحتث معدوما تقريباً فاغلب الحوادث تتضمن امتصاص فوتونات ساقطة من قبل ذرات في الحالة الدركية وانتقالها الى حالات متهيجة .

ان هذه الذرات المتهيجة سيكون بامكانها الرجوع بصورة مباشرة الى الحالة الدركية اما عن طريق الاشعة الانية او المستحثة او بامكانهم اتباع مسار اخر ليغيروا حالتها الى مستوى واطيء اخر غير المستوى الدركي وبهذه الطريقة يمكن للذرات ان تتدرج الى

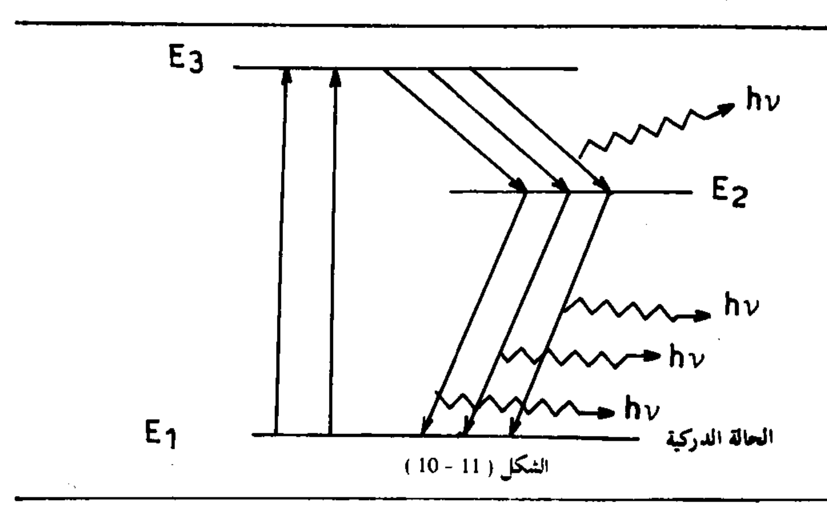
اسفل مقياس الطاقة باعثة عند كل مرحلة ، اشعة تختلف في ترددها عن تردد تلــك الاشعة التي رفعتهم اصلا من الحالة الدركية واستنادا الى علاقة بور فان الاشعة المحفــزة في العملية التعاقبية والتي تدعى بالفلورة ستمتلك ترددا اوطأ من تردد الاشعةالمهيجة.

ان احد اهم السمات المهمة التي تميزاشعة الليزرعن غيرها هوامتلاكها لصفة الترابط : ترابط مكاني والذي يعني ان الاشعة المستحثة لها نفس التردد والاتجاه والاستقطاب كالفوتون الاصلي وكذلك لها نفس الطور والسرعة (ترابط زماني). وكما هو متوقــع فان الاشعاعات المنبعثة في الانبعاث الاني لها اطوارعشوائية بالنسبة لبعضها الاخراذ ليس هناك اي تنسيق بين الذرات المعنية وبالتالي فان المطلوب هورفع الذرات من المستوي m الى المستوي n وهذا ما يدعى بالانقلاب الاسكانـي :

يمكن الحصول على الانقلاب الاسكاني بعدد طرق - الضخ الضوئي (pumping optical) والتفريغ الكهربائي (electrical discharge) والطرق الكيمياويــة وسنحاول هنا التركيز على النوع الاول

4 - 5 - 10 الضخ الضوئي

في هذه الحالة يتم تسليط ضوء متألق احادي الطول الموجي بحيث ان طاقته $(h\nu)$ تكون كافية لاثارة الالكترون من الحالة الدركية والى مستوى الحالة العالية (2) انظــر الشكل (11 - 10) .



الشكل (11 - 10)

من المعروف ان متوسط زمن بقاء الالكترون في اكثر المناسيب اثارة هو 10^{-8} ثانية لذا فان الذرات المتهيجة سوف تهبط الى الحالة شبه مستقرة او الى الحالة الدركية بصورة انية تقريبا . وحيث ان متوسط بقاء الذرات في المستوي شبه المستقر اكبر من ثانية واحدة لذا فان الاستمرار برفع الذرات للحالة (2) حتى يكون انشغال هذه الحالة اكبر من انشغال الحالة (1)

في هذه الحالة اذا سلطنا اشعاعا على النظام بتردد $\nu = (E_2 - E_1)/h$ فان الانبعاث المحتث سيزيد كثيرا على امتصاص الفوتونات وذلك لان معظم الذرات تكون موجودة في الحالة (2) وهذا يعني ان الاشعاعات الخارجة تكون اشد من الاشعاعات الداخلة ولكنها تمتلك التردد نفسه وتكون كذلك بالطور نفسه . ان هذه العملية هي اساس عمل الليزر (تضخيم الضوء بالاشعاع المستحث) .

5 - 5 - 10 توليد الليزر

ان وجود معظم الذرات في الحالة (2) - الشكل (11 - 10) سيؤدي الى تعاظم حدوث الانبعاث المحتث وزيادته كثيرا على ظاهرة امتصاص الفوتونات الساقطة. ان رجوع الالكترون من احد المستويات شبه المستقرة الى المستوى الدركي . كما يحدث اخيرا سيؤدي الى اشعاع فوتون تكون طاقته $h\nu$ مساوية لفجوة الطاقة $(E_2 - E_1)$

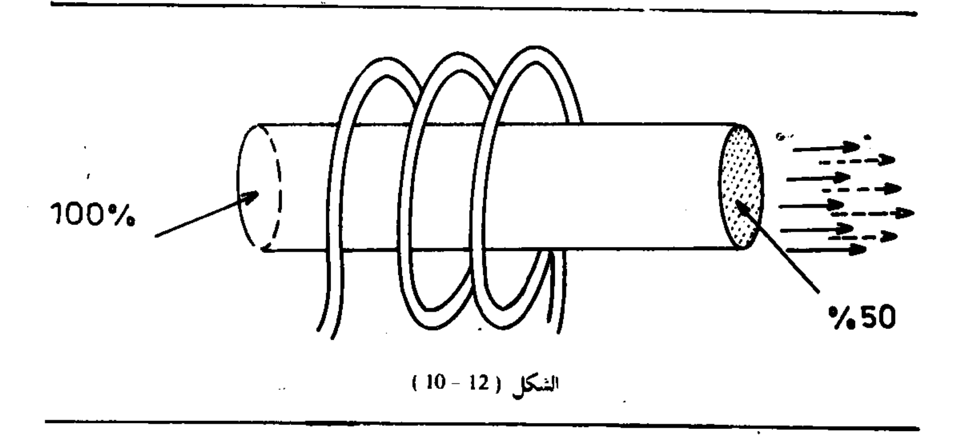
ان مرور هذا الفوتون المنبعث بذرة اخرى في المستوي شبه المستقر نفسه يمكن على الفور وتبعا لمبدأ الرنين . ان يشجع تلك الذرة على اشعاع فوتون له نفس التردد بالضبط ويعيدها الى المستوى الارضي ومن المدهش الى حد كبير . ان يكون لكل من الفوتون السابق واللاحق نفس التردد والاتجاه والاستقطاب كالفوتون الاصلي تماما (ترابط ماني) وكذلك نفس الطور والسرعة (ترابط مكاني) .

يمكن الان اعتبار كل من هذين الفوتونين بمثابة امواج اولية . وبمرورها بذرات اخرى في مناسيبها شبه المستقرة . فانها تشجعها على الاشعاع في نفس الاتجاه بنفس الطور ومع ذلك . يمكن ايضا تشجيع الانتقالات من المنسوب الارضي الى المناسيب المثارة وذلك بامتصاص الموجة الاولية وبالتالي ينشأ تفاعل متسلسل نتيجة اشعاع مترابط عالي الشدة .

ولانتاج الليزر ينبغي جعل الانبعاث المشجع متوازيا ويتم عمل هذا بتصميم تجويف ملائم يمكن فيه استخدام الامواج من جديد مرات عديدة .

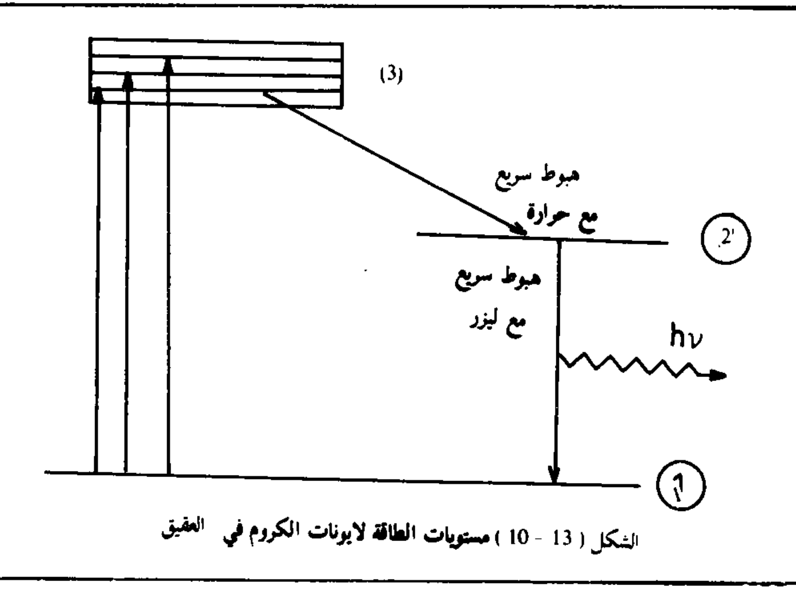
طبقا لما جاء اعلاه استخدم ميمان بلورة عقيق احادية اصطناعية وردية اللون كتجويف رنان لبناء اول ليزر بنجاح في عام 1960 . والعقيق اساسا بلورة شفافة من ثالث اوكسيد الألمنيوم (Al_2O_3) مطعمة بحوالي 0.05 بايونات كروم ثلاثية التكافؤ على شكل Cr_2O_3 والأخير هو المسؤول عن لونها الوردي . وتكون ذرات الالمنيوم والاوكسجين في (Al_2O_3) خاملة في حين ان أيونات الكروم هي المقومات الفعالة (الوسط الذي يتفاعل مع الاشعاع الكهرومغناطيسي : يقوم بامتصاصه وتكبيره) .

يعد ليزر العقيق اكثر اهمية من بين انواع ليزرات الحالة الصلبة ويتم اثارة المقومات الفعالة (ذرات الكروم) عن طريق تشعيعها من مصباح وميضي(flash lamp) لولبي عالي الشدة يمدها بالضخ الضوئي المناسب لاحداث الانقلاب الاسكاني ويوضح الشكل (12 - 10) الهيئة العامة لمثل هذا الليزر : – وهو عبارة عن اسطوانة من العقيق ويتراوح طولها ما بين 12 الى 10 سم محاطة بلفات المصباح الوميضي وقد قطعت وصقلت نهايتاها بحيث اصبحت مستويتين ومتوازيتين وفي ليزر عقيق نموذجي تكون احدى نهايتيه عالية الانعكاسية (حوالي ٪ 96) والاخري منخفضة الانعكاسية (حوالي ٪ 50)



الشكل (12 - 10)

عند قدح المصباح الوميضي فانه يبعث ضوءاً ابيض غير ان الامتصاص يحدث في الجزء الأزرق – الأخضر من الطيف بواسطة أيونات الكروم من خلال حزم الامتصاص العريضة (broad absorption bands) التابعة لها – انظر الشكل (13 – 10) وبهذا يرتفع عدد من الالكترونات من الحالة الدركية – المستوى (1)) الى داخل العديد من مستويات الطاقة العريضة – المستوي (3) – الواقعة فوق المستوى الدركي . من هذه



الشكل (13 - 10) مستويات الطاقة لايونات الكروم في العقيق

المستويات يمكن لهذه الالكترونات ان تغير حالتها انيا الى مستويات ادنى – المستوى (2) حيث تتجمع فيها الى درجة بحيث تصبح هذه المستويات ذات كثافة سكانية اعلى من الكثافة السكانية للمستوى الدركي وتحت مثل هذه الشروط يصبح العقيق مكبرا عند الطول الموجي 6943 انكستروم .

بقي ان نذكر اخيرا . ان انتقالات الالكترونات من المستوى (3) الى المستوى الوسطي (2) تكون سريعة وغير اشعاعية واما الفرق في الطاقة فانه يمنح الى الشبيكة البلورية كطاقة حرارية الامر الذي يؤدي بالتالي . الى تسخين اسطوانة الياقوت الى الحد الذي يمكن ان يفتتها ومن هنا فان جهاز التبريد المرافق لاجهزه الليزر . يلعب دورا رئيسيا في خفض درجة الحرارة الى الحد الذي يحافظ على اسطوانة العقيق ويسمح في الوقت نفسه باستمرار توليد الاشعة . كذلك يفسر ارتفاع درجة حرارة جهاز الليزر السبب الكامن وراء استخدام المصباح الوميضي بدلا من المصباح الدائم الاضاءة .

الاسئلة

10-1 ماذا يحدث عند سقوط الضوء على المواد الصلبة ؟ وضح ذلك

10-2 ما المقصود بالصفة الثنائية للضوء ؟ اشرح بالتفصيل

10-3 كيف تستجيب الشحنات التي تدخل ضمن تركيب المواد الصلبة للاشعة الكهرومغناطيسية ؟ وضح ذلك .

10-4 ما المقصود بالشفافية ؟ اشرح بالتفصيل

10-5 كيف ينشأ معامل الانكسار للمواد ؟ وما علاقة ذلك بالاستقطاب وضح ذلك .

10-6 عرف ما يأتي

a- المحور البصري

b- الانكسار المزدوج

c- بلورية احادية المحور الموجب

d- الشعاع الغريب

10-7 كيف يحدث الامتصاص في المواد للاشعة الكهروضوئية ؟ وضح بالتفصيل

10-8 اشتق المعادلة (11 - 10)

10-9 عرف ما يأتي

a- الظاهرة الكهروضوئية الداخلية

b- الامتصاص الاساس

c- الانتقال المباشر وغير المباشر

d- الاكزيتون

10-10 ما الفرق بين الانبعاث الاني والمحفز

10-11 ما هي الشروط الواجب توفرها لحدوث الانبعاث المحفز ؟

10-12 اشرح بالتفصيل عملية توليد الليزر . ثم اذكر خصائصه

10-13 لماذا يفضل العقيق على غيره في توليد الليزر ؟

الفصل الحادي عشر

العيوب البلورية

1 - 11 المقدمة : -

اذا كان بالامكان الحصول على بلورة خالية من العيوب اوالتشويه (defects) تماما فان هذ يعني ان الذرات التي تتألف منها البلورة سوف تتواجد فقط في مواقع الشبيكة وان ايا من هذه المواقع سوف يحتل من قبل ذرة واحدة . كذلك فان هذه الذرات سوف تحتوي على الاعداد اللازمة من الالكترونات وعند اوطأ مستوى للطاقة مما يعني استقرارها .

ولكن الذرات وكما هو معلوم،دائمة الاهتزاز حول مواقع الشبيكة . والالكترونات يمكن ان تتهيج وتنتقل الى مستويات طاقات اعلى . ان الاهتزاز الذري اوالتهيج الالكتروني يمكن اعتبارهما قياسا الى البلورة المثالية (perfect crystal) ، كعيوب في البلورة تعرف بالعيوب الذرية الثانوية . اما العيوب الاخرى التي يمكن تقسيمها وبترتيب تصاعدي حسب حجومها فهي :

1 - العيوب النقطية Point Defects
2 - العيوب الخطية Line Defects
3 - العيوب السطحية Surface Defects

ان شدة التركيز لنوع معين من هذه الاختلالات في البلورة يعتمد على نوع الشبيكة البلورية والطاقة الرابطة للشبيكة وكذلك على مدى التعقيد في هذا الاختلال . فبينما نجد ان اقصى بعد للاختلال النقطي في اي اتجاه لايمكن ان يتجاوز اكثر من عدد قليل من المسافات البينية بين الذرات فان الاختلال الخطي اوالسطحي يمكن ان يمتد ليشمل الملايين من الابعاد البينية الذرية في اتجاه واحد او اكثر من اتجاه .

ان الاختلالات ليست مهمة فقط في تحديد خواص المواد الصلبة لكنها تلعب ايضا دورا رئيسيا في تكوين الحالة الصلبة للمواد خلال عملية النمو البلوري وكذلك في تعين درجة انصهارها وفي مقدار تحمل المود الصلبة للاجهادات المسلطة ذلك ان الشدة الميكانيكية للبلورات النقية لاتتحدد فقط بواسطة القوى بين الذرات ولكنها تتحدد ايضا بواسطة العيوب في البناء البلوري

هذا وعلى الرغم من التغير (النقصان او الزيادة) الحاصل في الشدة الميكانيكية للمواد الصلبة وكذلك الانخفاض في درجة حرارة انصهارها بسبب وجود عيوب الشبيكة فان وجود مثل هذه العيوب يكون في بعض الاحيان ضروريا جدا في بعض الاجهزة ومن الامثلة على ذلك يكون وجود الشوائب المانحة او المتقبلة في اشباه الموصلات ضروريا جدا لتحديد الخواص الكهربائية لهذه المواد كما ان خلط الكاربون مع الحديد يؤدي الى زيادة تحمل هذا الاخير بشكل ملحوظ (الحديد يكون رخوا في حالته النقية) .

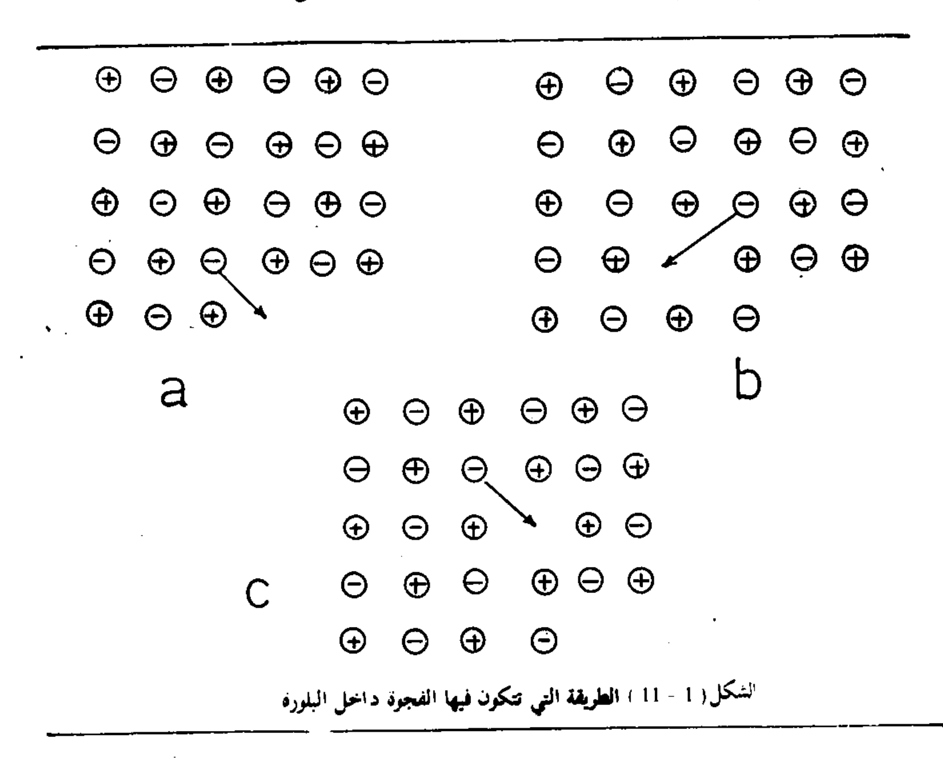
على ضوء ما تقدم وما لمسناه من الاهمية في التعرف على طبيعة ونوع اختلالات الشبيكة في المواد الصلبة لغرض تحديد سلوك هذه المواد الصلبة سنحاول هنا التكلم بشيء من التفصيل عن اهم الخصائص المميزة لهذه الاختلالات وانواعها .

2 - 11 العيوب النقطية :

يعرف الاختلال النقطي بانه عدم انتظام في البناء البلوري ويكون محل تواجده في الشبيكة البلورية ويمتاز بان اقصى بعد له في اي اتجاه لايتجاوز اكثر من عدد قليل من المسافات البينية بين الذرات . لذا فانه اما ان يكون على شكل فجوات اوذرات اضافية وهذه الاخيرة اما ان تكون ذرات اضافية بينية (interstitial) او ذرات اضافية استبدالية (substitutional)

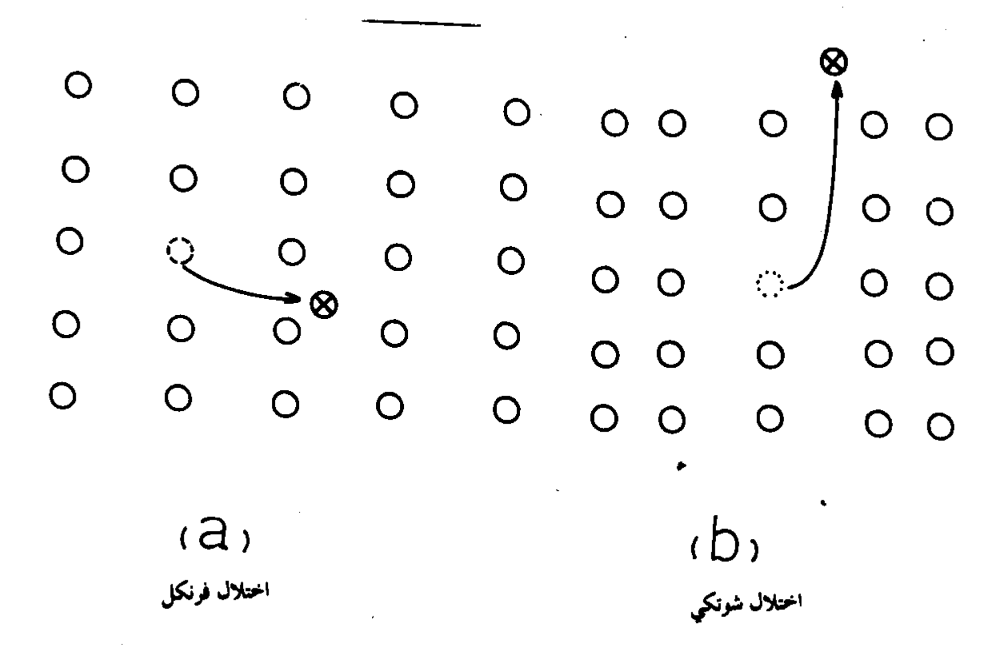
1 - 2 - 11 الفجوات

تتواجد الفجوات Vacancies في كل البلورات بغض النظر عن الطريقة التي يتم فيها تحضير البلورة . ان السبب الكامن وراء ظهور واختفاء هذه الفجوات باستمرار هو التذبذب الحراري للذرات حول مواقعها في الشبيكة . ذلك هو انه في كل درجات الحرارة التي هي فوق الصفر المطلق تكون الذرات عرضة للتذبذب الحراري حول مواقع التوازن في الشبيكة البلورية بمعدل سعة تزداد بازدياد درجات الحرارة . فاذا كان هناك عند درجة حرارية معينة . عدد كبير من الذرات المختلفة ذات السعات المختلفة فانه يصبح من المحتمل وبشكل كبير ان واحدة من هذه الذرات او اكثر سوف تنزاح عن موقعها الشبيكي المنتظم مخلفة بذلك الفجوة - انظر الشكل (1 - 11).



الشكل (1 - 11) الطريقة التي تتكون فيها الفجوة داخل البلورة

ان الذرة المزاحة اما ان تتخذ موقعها في مكان ما في الشبيكة بين الذرات كذرة اضافية ذاتية وانذاك يدعى الاختلال الناتج (الفجوه) باختلال فرنكل (Frenkel defect) او ان هذه الذرة المزاحة تنتقل الى سطح البلوره وعندئذ يدعى الاختلال الناتج (الفجوه) باختلال شوتكي (Schottky defect) - انظر الشكل (2 - 11)



الشكل (2 - 11) اختلالات الشبيكة

وبسبب الطاقة الاضافية اللازمة لادخال الذرة المزاحة بين ذرات الشبيكة الاخرى فان اختلال فرنكل يحتاج الى مقدار من الطاقة اكبر مما يحتاجه اختلال شوتكي. لهذا السبب فان اختلال فرنكل لايتواجد في المعادن الا تحت ظروف خاصة مما يشير الى حقيقة ان الفجوات تتواجد عادة قريبا من السطوح الحرة والحدود الحبيبية grian boundiers وكذلك الانخلاعات dislocations بدلا من ان تتولد داخل البلورة وذلك لعدم الحاجة الى توليد الذرات الاضافية اي عدم الحاجة الى الطاقة الزائدة.

2 - 2-11 عدد الفجوات في البلورة (اختلال شوتكي)

لدينا من النتائج المعروفة في الديناميكا الحرارية ان طاقة هيلموهولتز الحرة Helmholtz free energy للبلورة F ، تعطى بواسطة

$$F = E - TS \qquad \dots (11-1)$$

حيث تمثل E الطاقة الداخلية للبلورة ,T درجة الحرارة المطلقة ,S الانتروبي حيث ان

$$S = K_B \ln w \qquad \dots (11-2)$$

حيث تمثل K_B ثابت بولتزمان بينما w عدد الطرق التي يمكن ان ترتب فيها الذرات نفسها داخل البلورة

افرض الان ان البلورة تحتوي على عدد N من الذرات وان هناك n من ازواج الفجوات الناتجة عن ازالة n من الـ cations و من الـ anions من داخل البلورة لذا فان عدد الطرق . التي يمكن معها ازالة اي من هذه الايونات تعطى بواسطة

$$\frac{N(N-1)(N-2)\dots(N-n+1)}{n!} = \frac{N!}{(N-n)!n!} \qquad \dots (11-3)$$

عليه فان عدد الطرق المختلفة التي يمكن بها تكون n من ازواج الفجوات ، يمكن حسابها من تربيع المعادلة (3 - 11) ذلك لان عدد الايونات السالبة يساوي عدد الايونات الموجبة . ان زيادة عدد الفجوات المتولد سيؤدي طبقا للمعادلة (2 - 11) الى زيادة الانتروبي للبلورة . حيث ان

$$\Delta S = K_B \ln \left[\frac{N!}{(N-n)!n!} \right]^2 \qquad \dots (11-4)$$

والذي يؤدي بدوره الى تغير في طاقة هيلموهولتز الحرة بمقدار

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S \qquad \dots (11-5)$$

او ان

$$\Delta F = n E_p - K_B T \ln \left[\frac{N!}{(N-n)!n!} \right]^2 \qquad \dots (11-6)$$

حيث تمثل E_p الطاقة اللازمة لازالة زوج من الذرات داخل البلورة لذا فان nE_p تمثل التغير الكلي في طاقة البلورة .

لدينا من تقريب سترلنك Stirling's approximation ، ان

$$\ln x! = x \ln x - x \qquad \dots (11-6)$$

لذا فان

$$\ln\left[\frac{N!}{(N-n)!n!}\right]^2 \simeq 2\left[\ln N! - \ln(N-n)! - \ln n!\right]$$

$$\simeq 2\left[N\ln N - N - (N-n)\ln(N-n)\right]$$

$$\simeq 2\left[N\ln N - (N-n)\ln(N-n) - n\ln n\right] \qquad \dots (11-7)$$

عند التوازن الحراري تكون طاقة هلموهولتز الحرة للبلورة في ادنى مستوياتها وبالتالي فان المشتقة الاولى لهذه الطاقة تكون مساوية للصفر

$$\frac{d(\Delta F)}{dn} = 0 = E_p - 2K_BT\left[\ln(N-n) - \ln n\right]$$

$$= E_p - 2K_BT\ln\left(\frac{N-n}{n}\right) \qquad \dots (11-8)$$

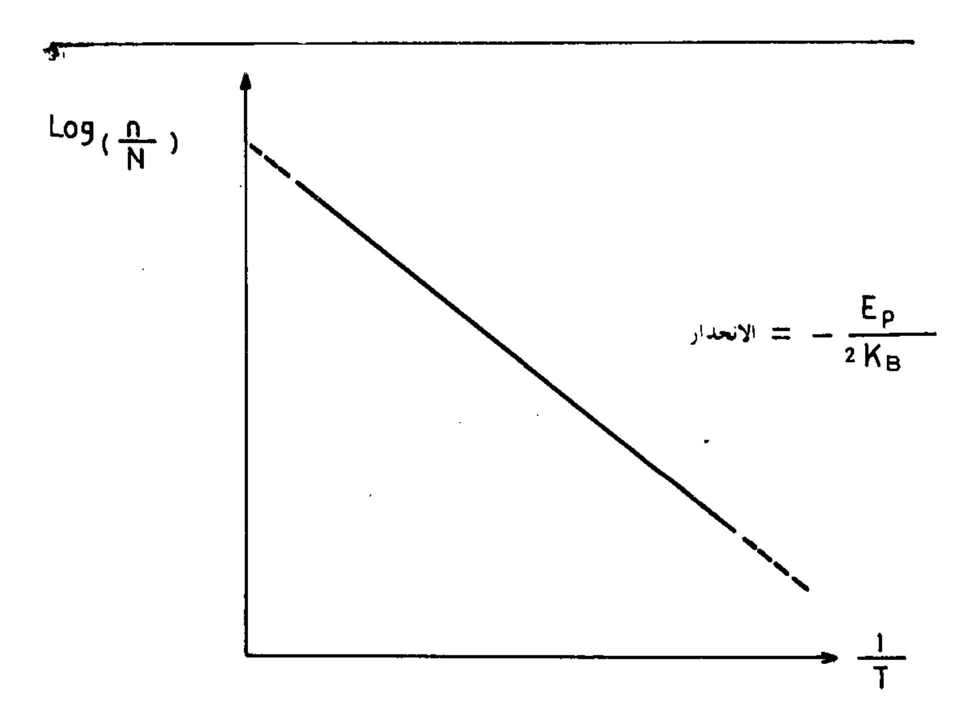
$$E_p = 2K_BT\ln\left(\frac{N-n}{n}\right) \qquad \dots (11-9)$$

$$\frac{N-n}{n} = e^{E_p/2K_BT} \qquad \dots (11-10)$$

ان عدد الفجوات في البلورة يكون عادة . اصغر من عدد الذرات في البلورة وعليه فان $n << N$ وبالتالي فان $N - n = N$ وبالتالي فان العلاقة (10 - 11) اعلاه تختصر الى

$$n = N e^{-E_p/2K_BT} \qquad \dots (11-11)$$

فعلى سبيل المثال . اذا كانت الطاقة اللازمة لازالة زوج الايونات من كلوريد الصوديوم ، هي 2eV لذا فان عدد الفجوات سيكون عند درجة حرارة الغرفة تبعا للمعادلة (11 - 11) . مساويا لـ 10^{12} فجوة /م^{3} بينما تكون عدد Na^{+} و Cl^{-} في $1m^{3}$ مساوي لـ 10^{28} لذا فان هناك فجوة واحدة لكل 10^{16} ايون . لذا فان اهمال n مقارنة مع N في المعادلة (10 - 11) يكون معقولا. وعلى الرغم مما جاء اعلاه ، فان عدد الفجوات يزداد بسرعة عند ارتفاع درجة الحرارة فاذا كان عدد الفجوات عند درجة حرارة 300K هو 10^{12} فان عددها سيكون عند 900K هو 10^{22} فجوة – لذا فان رفع درجة الحرارة بعامل قدره 3 يسبب زيادة في في عدد الفجوات بمرتبة قدرها 10^{10} ويوضح الشكل (3 - 11) العلاقة الخطية بين $\log\left(\frac{n}{N}\right)$ و $\frac{1}{T}$. حيث ان انحدار المستقيم الناتج هو $\left(-\frac{E_p}{2K_B}\right)$ لذا فانه بالامكان حساب الطاقة الداخلية للبلورة E_p



الشكل (3 - 11) تغير عدد الفجوات (n) مع معكوس درجة الحرارة

11-2-3 اختلال فرنكل

مرة اخرى ان التغيرفي طاقة هيلموهولتز الحزة للبلورة بسبب خلق n من اختلالات فرنكل ، سيكون مساويا لـ

$$F = n E_i - K_B T \ln \frac{N!}{(N-n)!n!} \; \frac{N_i!}{(N_i - n)!n!} \qquad \ldots (11-12)$$

حيث تمثل E_i الطاقة اللازمة لازاحة الذرة من موقعها الاصلي في البلورة المثالية الى موقعها بين الذرات وN عدد الذرات في البلورة و N_i عدد المواقع البينية التي يمكن للذرات احتلالها

لدينا من صيغة سترلنك ، ان

$$\ln \frac{N!}{(N-n)!n!} + \ln \frac{N_i!}{(N_i + n)!n!} \simeq N \ln N + N_i \ln N_i - (N-n)$$

$$\ln (N-n) - (N_i - n) \ln (N_i - n) - 2n \ln n \qquad \ldots (11-13)$$

وعند التعويض عن المعادلة (13 - 11) في المعادلة (12 - 11) واخذ التفاضل لها بالنسبة لـ n . نحصل على

$$\frac{dF}{dn} = E_i - K_B T \ln \frac{(N-n)(N_i - n)}{n^2} \qquad \ldots (11-14)$$

عندالتوازن لدينا ان $\frac{dF}{dn} = 0$ ، وحيث ان $N >> n$ وكذلك $N_i >> n$ لذا فان

$$\frac{E_i}{K_B T} \simeq \ln \frac{NN_i}{n^2} = \ln (NN_i) - 2 \ln n \qquad \ldots (11-15)$$

وبعد الترتيب نحصل على

$$\ln n = \frac{1}{2} \ln (NN_i) - \frac{E_i}{2K_B T} \qquad \ldots (11-16)$$

او ان

$$n = (NN_i)^{1/2} e^{-E_i/2K_B T} \qquad \ldots (11-17)$$

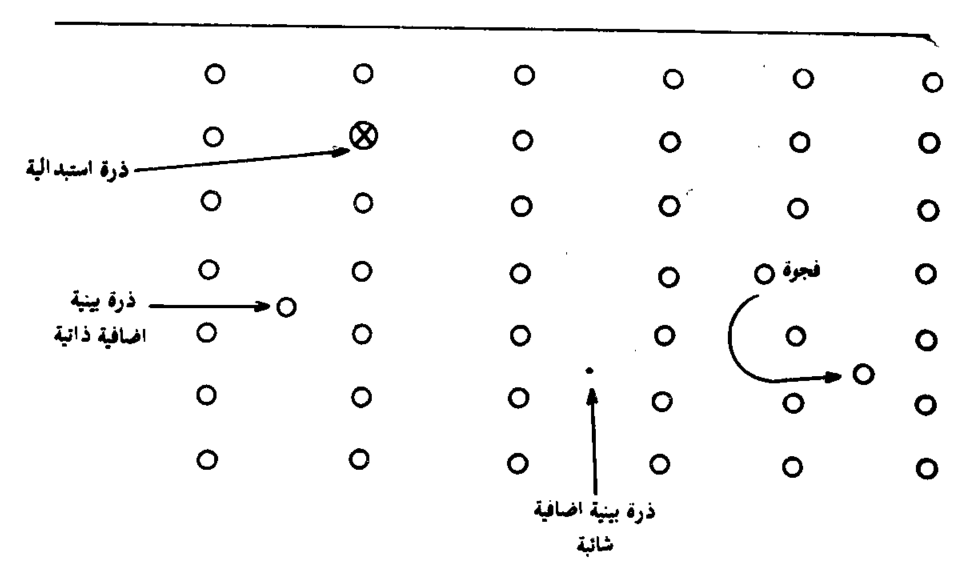
واضح ان المعادلة (17 - 11) لها نفس صيغة المعادلة (11 - 11) وان وجود اختلال فرنكل او شوتكي يعتمد اساسا على قيمة كل من E_i , E_p . على اية حال ان تقدير الطاقة اللازمة لخلق الفجوة - طاقة التكوين E_p او E_i formation energy - يمكن ان يتم عن طريق تصور الذرة عند موقعها في الشبيكة بأنها مرتبطة الى جاراتها بعدد من الأواصر الكيميائية التي تمسكها في موقعها وان ازالة هذه الذرة يعني كسر هذه الأواصر . الأمر الذي يلزم مقداراً من الطاقة مساوياً الى حد ما الى عدد الأواصر (عدد الاحداثيات) مضروباً بالطاقة اللازمة لكسر الآصرة الواحدة . وحيث ان الطاقة اللازمة لكسر الآصرة الواحدة هي حوالي 0.5 اليكترون فولت . لذا فاننا نتوقع ان طاقة التكوين سوف تكون مساوية الى اليكترون فولت . وهو مايتفق مع المشاهدات العملية .

الان وعلى فرض ان البلورة هي في حالة توازن حراري عند الدرجة الحرارية T كل ذرة عندئذ ، سوف تتذبذب جيئة وذهابا حول موقع تعادلها وان معدل الطاقة ، عند درجات الحرارة العالية ، هي $3K_BT$. هذه الطاقة عندما تكون درجة الحرارة 25 درجة مئوية ، تساوي 0.08 الكترون فولت وهي بذلك اقل من طاقة التكوين للفجوة . لذا فانه لا يمكن خلق الفجوة عند هذه الدرجة الحرارية . ان الكمية $3K_BT$ تمثل فقط ، معدل الطاقة للذرة وليست الطاقة الحقيقية عند كل لحظة خلال تذبذبها .

11 - 2 - 4 الذرات الاضافية

يلاحظ من الشكل (4 - 11) ان الذرة الاضافية باستطاعتها احتلال واحد من موقعين متميزين في البلورة . فاذا كان موقعها في الشبيكة ، ياخذ مكان الذرة الاصلية فانها تدعى عندئذ بالذرة الاستبدالية substitutional atom . اما اذا احتلت مكانها بين الذرات الاصلية للبلورة فانها تدعى حينذاك بالذرة البينية interstitial atom - وتكون على نوعين : ذاتية اذا كانت من نفس نوع ذرات المادة او ذرات زائدة تدخل الى شبيكة البلورة اما في اثناء عملية نمو البلورة اويتم ادخالها بواسطة الطرق المعتادة عند تطعيم المواد وتدعى بالذرات البينية الشائبة
واذا تساءلنا عن اي الموقعين سوف تتخذه الذرة الاضافية . فهذا يعتمد على

حجم هذه الذرة بالنسبة الى الذرة الاصلية فكلما كانت الذرة صغيرة كان احتمال كونها ذرة بينية اكبر . ففي المعادن تكون الذرات البينية هي الكاربون والنايتروجين والاوكسجين والتي هي ذرات صغيرة يكون نصف قطرها اقل من 0.8 انكستروم الا انه يجب ان نتذكر انه من غير الممكن ادخال ذرة اضافية في المعادن المرصوصة كما هي الحال في النحاس او الخارصين ولكن الامر يصبح مختلفا في الشبيكات المفتوحة نسبيا مثال ذلك الماس حيث ان هناك العديد من الاماكن لهذه الذرات الاضافية والتي يمكن توفيرها باعادة ترتيب بسيط للذرات المجاورة والقريبة .



الشكل (4 - 11) انواع الذرات الاضافية في البلورات

ان طاقة البلورة تزداد عند تكون الذرة اضافية ، ذلك لان هذه الاخيرة سوف تحشر نفسها في منطقة تصبح قوى التنافر بينها وبين جاراتها كبيرة جدا . ان حساب طاقة التكوين للذرات الاضافية بصورة دقيقة لا تبدو مهمة سهلة ، ذلك لان منشأ هذه الطاقة يكون مختلفاً في الشبيكات المختلفة كذلك فان قيمة هذه الطاقة تختلف هي الاخرى باختلاف البلورات ، ففي البلورات المتراصة مثال ذلك بلورات المعادن (hcp) , (fcc) تكون طاقة التكوين عادة كبيرة وربما تصل الى 3 او الى 5 اليكترون فولت بينما تكون في البناء المفتوح صغيرة ومثال ذلك الجرمانيوم .

وباتباع نفس الخطوات عند حسابنا عدد الفجوات في البلورة ، نجد ان عدد الذرات الاضافية في حالة التوازن الحراري (n_i) في بلورة معينة هي :

$$n_i = AN\, e^{-E/2K_BT} \quad \dots (11 - 18)$$

حيث تمثل E طاقة التكوين للذرة الاضافية وA هو عدد صحيح (عادة ما يكون صغيرا) والذي يحدد عدد المواقع المتوفرة للذرات الاضافية في الشبيكة .

هذا وكما رأينا ، ان اختلال فرنكل هو نوع من الذرات الاضافية الذاتية وان الشوائب الاضافية تتواجد عادة عندما تتواجد ذرات غريبة داخل الشبيكة البلورية وتتخذ مواقعها في الفراغات بين الذرات . ان طاقة التكوين لهذه الشوائب هي نوع من الاجهاد المرن للشبيكة وعليه فان دخولها الى الشبيكة يكون سهلا ذلك لان E_i للذرات الصغيرة هي اقل مما للذرات الكبيرة . ان الامثلة على الذرات الصغيرة كثيرة ومنها ذرات الهيدروجين والكاربون والاوكسجين والنيتروجين والتي يمكن ان تكون ذرات اضافية شائبة في المعادن .

3 - 11 العيوب الخطية (الانخلاعات) :.-

الانخلاع dislocation نوع من الاختلال الخطي الذي يصيب الشبيكة البلورية وهو العامل المسوول عن الانزلاق الناشيء من الاجهادات الصغيرة . ان الافتراض الاساس لنظرية الانخلاع هو ان الشبيكة ليست متماسكة تماما . ذلك لانه في حالة التماسك فان جهد القص shear strees الجهد اللازم لفصم مستويين من الذرات احدهما عن الاخر ، يجب ان يحرك الذرات في النهاية البعيدة مسافة مساوية لتلك التي تتحركها الذرات في النهاية القريبة

ان لدونة المعادن النقية هي بالضرورة بسبب وجود الانخلاعات التي تقلل من مقاومة المعادن للسيلان المرن . ذلك لان الانخلاعات تكون حرة الحركة اذا ما تم منع مثل هذه الانخلاعات من التحرك فان شدة التحمل لمثل هذه المواد سوف تزداد بشكل كبير .

ان مفهوم الانخلاع يساعدنا كثيرا على فهم الكثير من الظواهر المرافقة لسلوك المعادن وان هناك نوعين من الانخلاعات هما : الانخلاع الحافي edge dislocation والانخلاع البريمي screw dislocation .

على اية حال وقبل التعرض لكلا النوعين من الانخلاعات ، يكون من الضروري ان ندرس اولا شدة التحمل في البلورات والطريقة التي يتم بها حسابها .

1 - 3 - 11 شدة التحمل في البلورات الاحادية :

تمتلك البلورات الاحادية شدة تحمل اقل بكثير مما هو متوقع من نظرية المرونة البسيطة . ان شدة التحمل عادة ما تقاس بدلالة حدود المرونة elastic limit والذي يعرف بأنه اعلى جهد يمكن للبلورة ان تتحمله قبل الانهيار اي الخروج عن حد المرونة. هذا وقد وجد فرنكل Frenkel طريقة نظرية بسيطة لايجاد شدة القص في البلورات الاحادية . لفهم هذه الطريقة سنعرف قوة القص بالقوة اللازمة لفصم مستويين من الذرات احدهما عن الاخر .

في مناطق الاجهاد الصغيرة يرتبط الجهد τ بالازاحة δ بالمعادلة

$$\tau = \frac{G\delta}{d} \qquad \ldots (11 - 19)$$

تمثل d المسافة العمودية بين المستويات الذرية - انظر الشكل (11 - 5b) و G عامل القص ويساوي حوالي 10^{11} داين /سم .

الان اذا فرضنا استمرار الازاحة الى الحد الذي تقع فيه الذرة (1) في منتصف المسافة بينها وبين الذرة (3) ،فان توازن المستويات الذرية سوف يختل ويصبح غير مستقر وحينئذ يؤول الجهد الى الصفر - انظر الشكل (11 - 5a) - وكتقريب اولي يمكن التعبير عن الجهد τ والازاحة δ بدالة جيبيه . اي ان :

$$\tau = G\frac{a}{d}\left(\frac{1}{2\pi}\sin\frac{2\pi\delta}{a}\right) \qquad \ldots (11 - 20)$$

حيث يمثل المسافة البينية بين الذرات

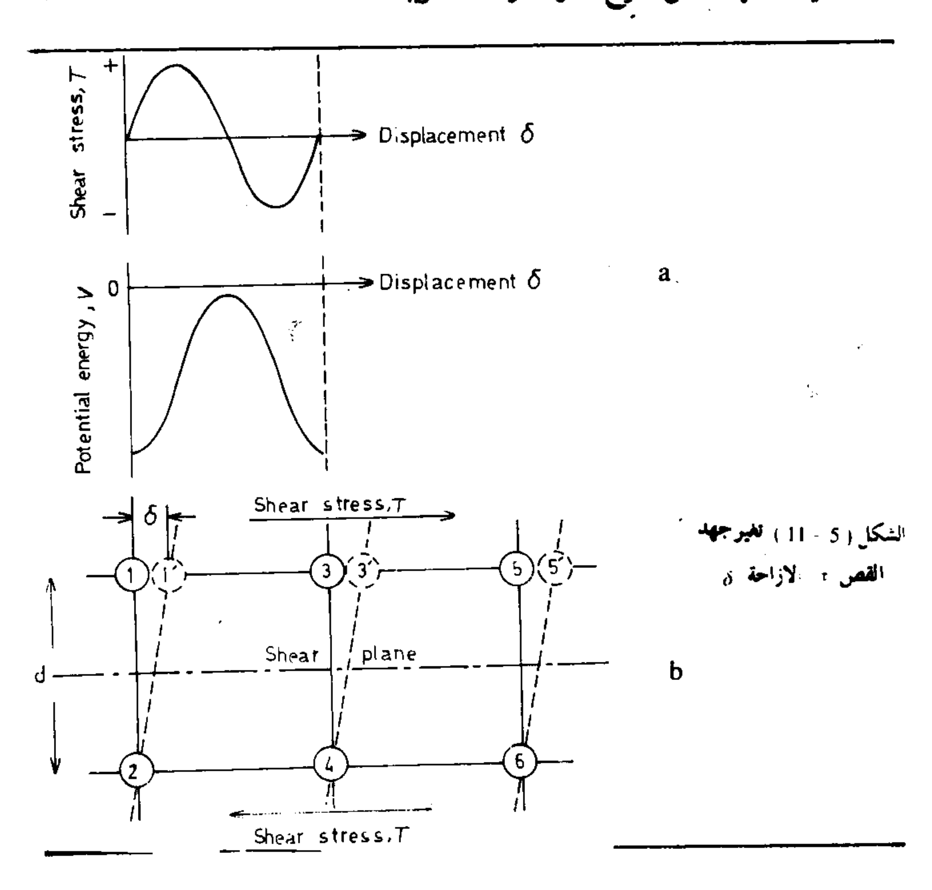
يلاحظ ان المعادلة (11 - 20) اعلاه تؤول الى المعادلة (11 - 9) لقيم δ الصغيرة . اما عند جهد القص الحرج τ_c فان الشبكة تصبح في حالة غير مستقرة ويعطى جهد القص الحرج بالقيمة العظمى لـ τ اي ان

$$\tau_c = \frac{Ga}{2\pi d} \qquad \ldots (11 - 21)$$

عندما تكون $\delta = \frac{a}{4}$ او ان $\theta = \frac{2\pi\delta}{G} = \frac{\pi}{2}$
الآن اذا كانت $a = d$ فعندها يكون τ_c مساويا ل

$$\tau_c = \frac{G}{2\pi} \approx \frac{G}{6} \quad \ldots (11 - 22)$$

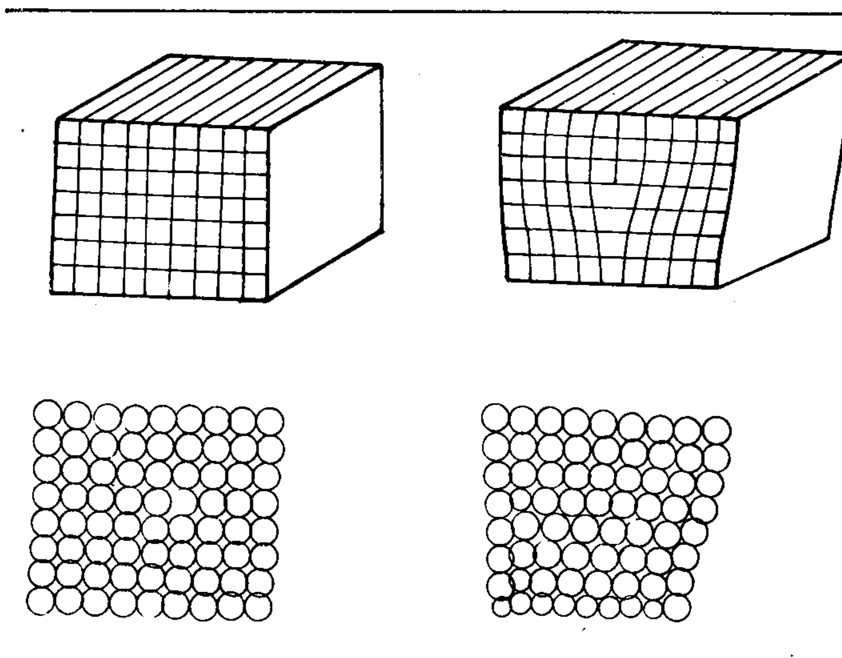
اي ان جهد القص الحرج يساوي تقريبا $\frac{1}{6}$ معامل القص
على اية حال ، عند مقارنة النتائج التجريبة مع القيم المحسوبة من المعادلة (22 - 11) وجد ان القيم المشاهدة للحد المرن هي اقل بكثير من القيم التي حسبت باستعمال المعادلة اعلاه . ومع هذا فانه بالامكان تصحيح المعادلة النظرية لتتفق مع التجربة لو اخذنا في الاعتبار القوى الداخلية المؤثرة بين جزيئات البلورة وكذلك التراكيب ذات الاستقرار الميكانيكي التي يمكن ان تأخذها الشبيكة في حالة قصها . وبأخذ هذين العاملين اثبت ماكنزي (Mackenzie) ان القيمة النظرية لشدة القص تنخفض الى $\frac{G}{30}$ وتناظر هذه القيمة اجهاد قص حرج قدره درجتان تقريباً .



الشكل (5 - 11) تغير جهد القص τ لازاحة δ

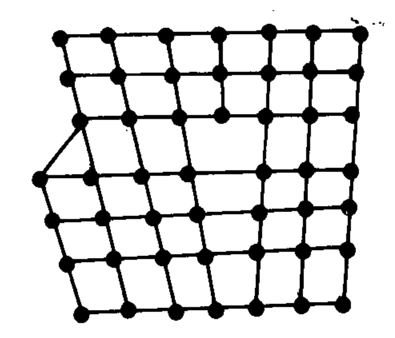
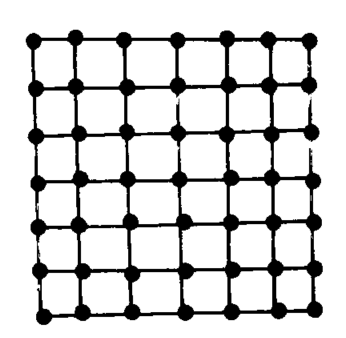
2 - 3 - 11 الانخلاع الحافي :

يعرف الانخلاع الحافي edge dislocation بانه نوع من الانخلاع الخطي ويكون محل حدوثه الشبيكة البلورية وان ابسط انواعه هو الذي يكون فيه خط الانخلاع مستقيما . يتحدد موضع هذا الخط بمستوى رأسي تزداد كثافة الذرات في الجزء العلوي منه ويمتد انخلاع الحافة البسيط بغير حدود في مستوى الانزلاق وفي اتجاه عمودي على اتجاه الانزلاق – انظر الشكل (6 - 11).



الشكل (6 - 11) الانخلاع الحافي في البلورات

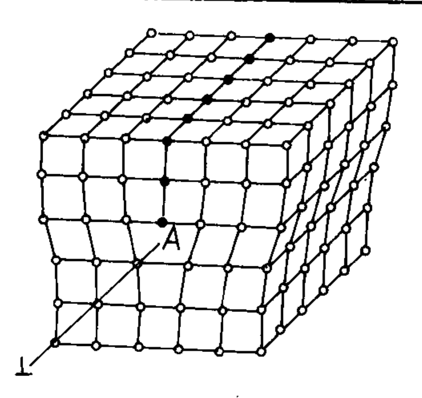
ان تكون الانخلاع الحافي في البلورات يمكن ان يتم تصوره عن طريق عملية الانزلاق في البلورة فاذا ما سلط جهد قص على النصف الاعلى من البلورة ومن احد الجهات مع الحفاظ على الجانب الاخر متماسكا . فان الانزلاق سوف يحدث في تلك الجهة ويوضح الشكل (7 - 11) ان الجانب الايسر قد انزلق مسافة تساوي ثابت الشبيكة نتيجة لتسليط الجهد على النصف الاعلى من هذه البلورة ومن الجهة اليسرى .

الشكل (7 - 11) حركة احد الانخلاعات بتاثير قص يعمل على تحريك السطح العلوي للعينة

ان الجهد الخارجي اللازم لتحريك الانخلاع وحدوث الانزلاق ، يكون في العادة صغيرا وقد اثبتت الحسابات التي اجريت : ان الجهد اللازم لتحريك الانخلاع في بلورة غير مثالية يكون صغير في قيمته وقد لايتجاوز 10^5 داين / سم^2 . لذلك يمكن القول ان الانخلاعات تزيد من لدونه البلورات وتحرك انخلاع واحد خلال البلورة يكافيء انزلاقاً طوله يساوي طول وحدة الخليه . ان حركة انخلاع الحافة في البلورة يشبه انتقال انثناء صغيرعبرسجادة ، وفي هذه الحالة ينتقل الانثناء من ناحية الى الناحية المقابلة والوضع النهائي يكافيء انزلاق السجادة وحركه الانثناء أسهل وأيسرمن احداث الانزلاق في السجادة

على اية حال ، ان النتيجة النهائية لهذه العملية هي انه في مكان ما في منتصف الجزء العلوي من البلورة سينشأ نصف مستوى إضافي من الذرات يمثله الخط – لكون الرسم في بعدين – المؤشر بالنقاط الدائرية – انظر الشكل(8-11)هذا المستوى الاضافي من الذرات هو الانخلاع ويعرف بالانخلاع الحافي اما الخط الذي يمثل انتهاء نصف المستوى الاضافي والعمودي على الورقة خلال النقطه A فيدعى بخط الانخلاع أو احداثي الانخلاع وهو يمتد بغير حدود في مستوى الانزلاق وباتجاه عمودي على اتجاه الانزلاق .

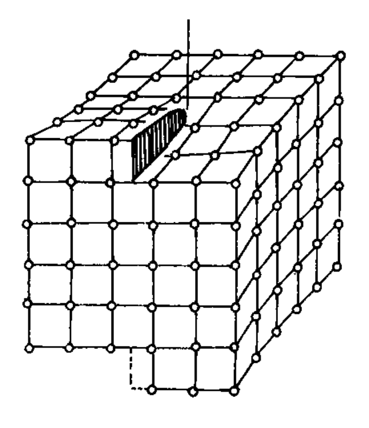


الشكل (8 - 11) خط الانخلاع والمستوى الاضافي من الذرات في انخلاع الحافة

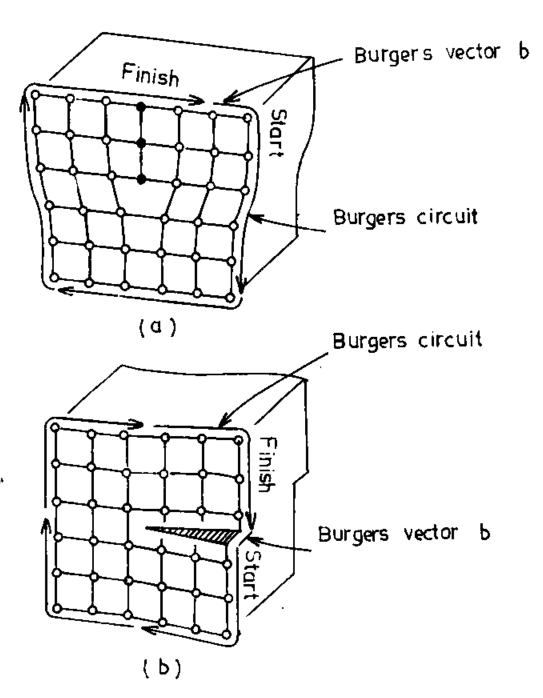
3 - 3 - 11 الانخلاع البريمي :

هو النوع الثاني من انواع الانخلاع ويوضحه الشكل (9 - 11). ويكون الحد الفاصل بين الجزئين المنزلق وغير المنزلق من البلورة موازيا لاتجاه الانزلاق بدلا من ان يتعامد عليه كما هو الشأن في انخلاع الحافة – انظر الشكل (10 - 11) .فلو تصورنا انه بالامكان قطع البلورة بسكين حاده الى جزاين ثم اعيد الجزآءن من جديد بعد ازاحة احدهما الى الاعلى او الى الاسفل . من موضعه الاصلي بمقدار ذرة واحدة فان الشكل الناتج هو نفس الشكل الذي ينشأ من أثر انخلاع بريمي screw dislocation _ ان الازاحة المذكورة تعادل قصا قدره ذرة واحدة . ان سبب تسمية هذا النوع من الانخلاع بالبريمي يعود الى انه اذا ما تحركنا في المستويات الذرية المتعاقبة حول الانخلاع ، وكما هو موضح بواسطة الاسهم – الشكل (11 - 11) ، فاننا سنجد ان المستوى الناتج هو بالحقيقة مستوى حلزوني .

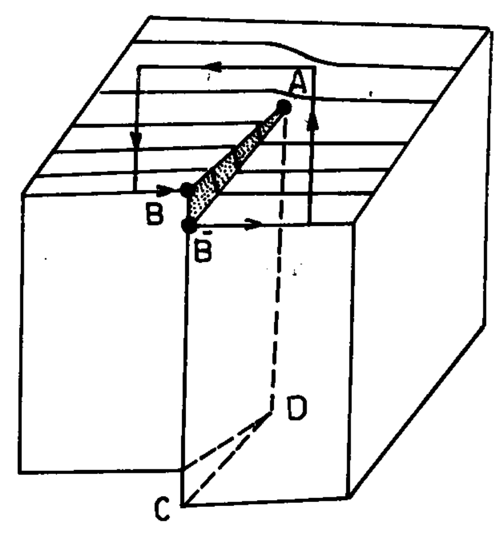
على اية حال ، تعتبر منطقة الانخلاع البريمي منطقة ذات اجهاد كبير كما هو علية الحال في الانخلاع الحافي -بسبب الانزلاق – إلا أنه اجهاد من نوع قص لا يسبب تغيراً في حجم البلورة كما يحدث في الانخلاع الحافي . كذلك فان طاقة الانخلاع البريمي ، طاقة الاجهاد المرافقة للانخلاع ، هي من نفس مرتبة طاقة الانخلاع الحافي وتكون مساوية الى حوالي 10 الكترون – فولت لوحدة الاطوال الذرية . هذه الطاقة هي كبيرة الى حد ما عند مقارنتها مع الطاقة الحرارية عند درجة حرارة الغرفة وبهذا فان الانخلاعات لاتتولد حراريا وانما بالمعالجة الميكانيكية كاللوي والطرق .



الشكل (9 - 11) الانخلاع البريمي في البلورات



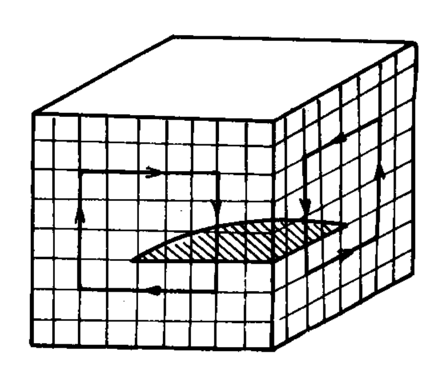
الشكل (10 - 11) دوائر ومتجه برجرز في الانخلاعين (a) الحافي و(b) البريمي

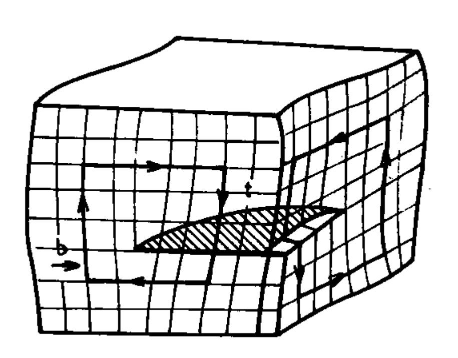


الشكل (11 - 11) المساحة المظللة تمثل منطقة الانزلاق والخط AD يمثل الانخلاع البريمي اما الخطوط على السطح العلوي فتمثل المستويات الذرية (النقطتان B , B′ كانتا منطبقتين قبل حدوث الانزلاق) .

بقي ان نذكر هنا ان اي خط عام للانخلاع هو بالحقيقة انخلاع مركب . تشتمل على كلا النوعين من الانخلاعات :

الانخلاع الحافي والانخلاع البريمي – انظر الشكل (12 - 11) . في هذا الشكل تم تمثيل الانخلاع المركب بالمساحة المضللة والتي يحدها الخط المنحني بينما ظهر الانخلاع الحافي في الجهة الامامية اما الانخلاع البريمي فقد ظهر في الوجه الايمن .





الشكل (12 - 11) الانخلاعات المركبة في البلورات

ان الحصول على مثل هذا الانخلاع يمكن ان يتم عن طريق فصل الذرات الواقعة على جانبي السطح الذي يحدده المنحني السابق وتمثله المساحة المظلله ومن ثم العمل على ازاحة المادة الواقعة على احد جانبي السطح بمقدار b بالنسبة للسطح الأخر ، حيث يمثل b مقدار الازاحة واتجاهها ويدعى بمتجة برجرز . ويلاحظ في الشكل انه على الرغم من ان دائرة برجرز قد ظهرت باتجاه عقرب الساعة بالنسبة للانخلاع الحافي وبعكس اتجاه عقرب الساعة بالنسبة للانخلاع البريمي إلا ان b قد ظهر وله نفس الاتجاه والقيمة في كلا الانخلاعين .

على اية حال إن الازاحة النسبية لاحد الجوانب اعلاه ، اما ان تحدث فجوة في البلورة او انها تسبب تشابكا في الجزأين معتمدا بذلك على اتجاه الازاحة فاذا ما حدثت الفجوة فانه يلزم اضافة جزء من المادة لملئها أو ان ازالة جزء من المادة لمنع التشابك . حينئذ تتحرك المادة لتحصل على توازنها الداخلي وبذلك نحصل على شكل من الاجهاد هويعينه ما ينشأ عن الانخلاع اما خط الانخلاع فيمثلـه المنحنـي المرسوم داخل البلورة .

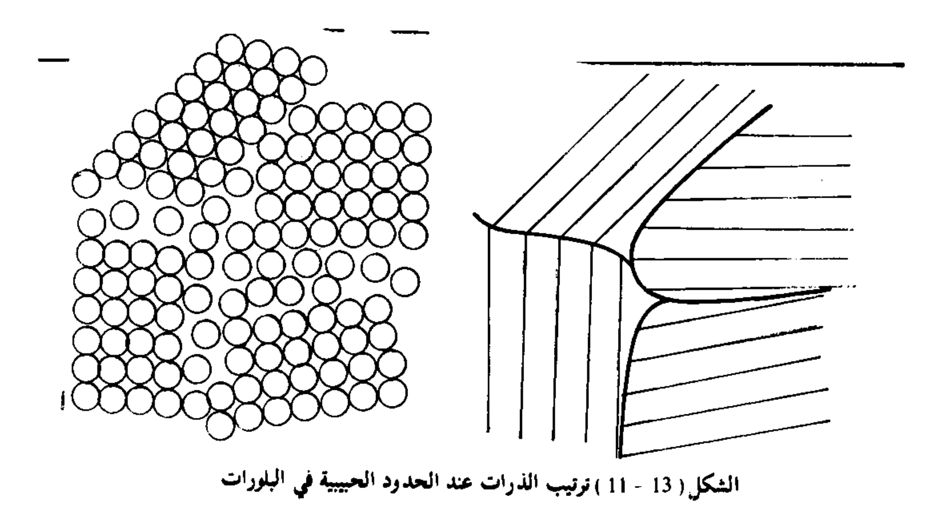
4 – 11 العيوب السطحية :

وهي عيوب مستوية plane defects وهي بذلك تمتد في بعدين ويكون محل حدوثها عند سطوح البلورات الا ان سمكها قد يتجاوز اكثر من قطر ذري واحد داخل البلورة ، وتكون على نوعين :

a الحدود الحبيبيـــة :

تظهر الحدود الحبيبية grian boundries في المواد العديدة التبلور وهي بذلك تمثل الحدود الفاصلة بين هذه البلورات الداخلة ضمن تركيب المادة (البلورات ذات التركيب الكيمياوي نفسه . – انظر الشكل (13 – 11) او بين تلك البلورات ذات التراكيب الكيمياوية المختلفة.

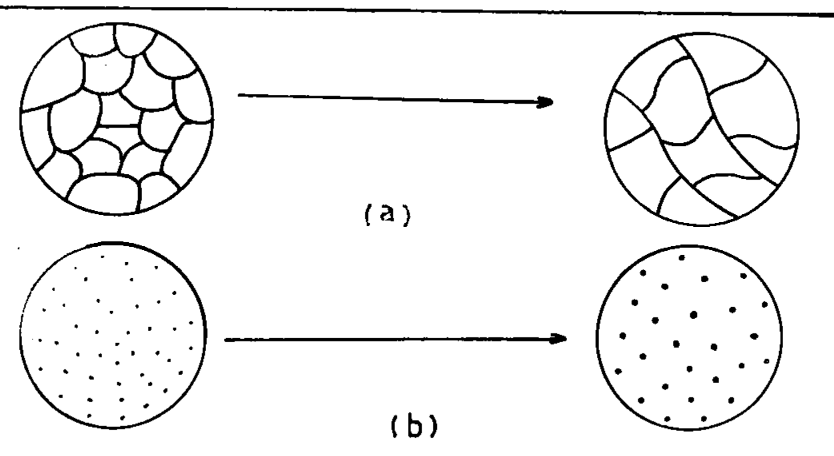
ان وجود ظاهرة تعدد التبلور poly crystalline في المواد ، شيء مالوف فقطعة من الحديد او النحاس لا تكون في العادة بلورة واحدة. ان ظاهرة تعدد التبلور في المواد تحدث اثناء عملية التصلب solidification للمواد او اثناء عملية اعادة التبلور recrystallization



الشكل (13 - 11) ترتيب الذرات عند الحدود الحبيبية في البلورات

مما جاء اعلاه يتبين لنا ان وجود ظاهرة تعدد التبلور ، يشير الى ان هذه البلورات ليست باتجاه واحد وانما تتخذ اتجاهات مختلفة بحيث ن الزاوايا التي تعملها البلورات مع بعضها الاخر تكون عادة ، اكبر من 15-10. ولهذا السبب فان الحدود الحبيبية تعرف ايضا بالحدود ذات الزوايا الكبيرة high angle boundaries

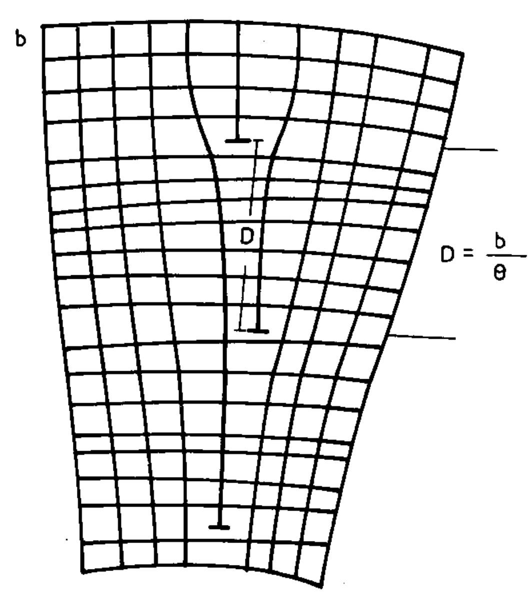
ان الطاقة التي تمتلكها الحدود الحبيبية هي عادة طاقة عالية 1 - 0.2 جول / م^2 وكنتيجة لذلك فهي عيوب غير متوازنة وبالتالي فان البلورة تعمد دائما الى التقليل من مساحة الحدود الحبيبية – انظر الشكل(14-11)بغية التقليل من الطاقة الحرة للبلورة .



الشكل (14 - 11) الكيفية التي يتم بها تقليل الطاقة الكلية للحدود الحبيبية في البلورات اثناء (a) نمو الحبيبات الحدودية في المواد احادية التبلور (b) تجمع الحبيبات على بعضها في المواد عديدة التبلور

على اية حال ، ان طاقة الحدود الحبيبية التي تفصل بين البلورات ذات التركيب الكيمياوي نفسه ، تعتمد فقط على درجة عدم التوافق بين اتجاه البلورات المتجاورة اما في حالة البلورات ذات التراكيب الكيمياوية المختلفة فان الطاقة تعتمد على مدى عدم التشابه الكيمياوي .

من جهة اخرى ، عندما يكون عدم التوافق في الاتجاه بين البلورات المتجاورة ذات التركيب الكيمياوي المتشابه هو اقل من '10 – انظر الشكل(15-11)– فان الحدود الفاصلة عندها تدعى بحدود الزوايا الصغيرة small angle boundiers ، وهي تنقسم الى نوعين : (1) حدود انحدارية tilt bounderies ,(2) حدود ملتوية (twist bounderies)



الشكل (15 - 11) حد انحداري يتكون من عدد من انخلاعات الحافة المفصولة عن بعضها بمسافات متساوية

ان الحدود الانحدارية يمكن ان تتولد من عدد من انخلاعات الحافة بينما تنتج الحدود الملتوية من الانخلاعات البريمية . ان زاوية عدم توافق الاتجاه للحدود الانحدارية ، يعطى بواسطة

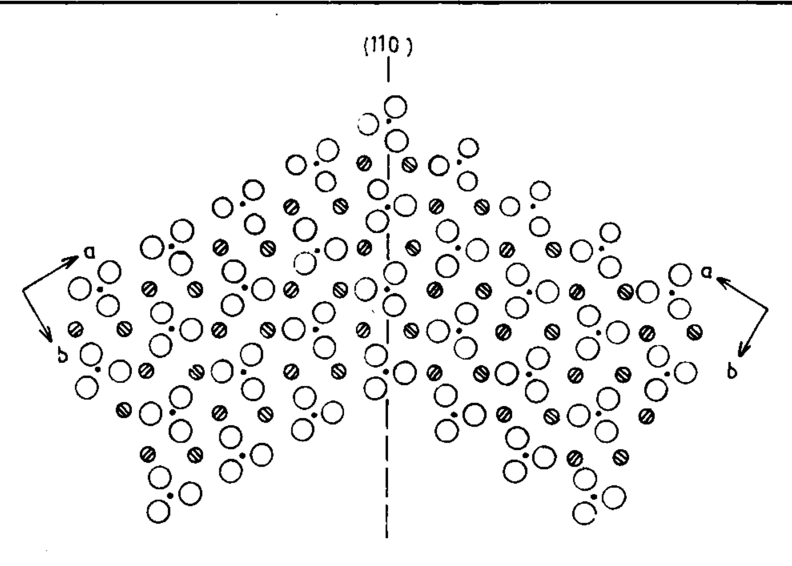
$$\tan\theta = \frac{b}{D} \qquad \ldots (11-23)$$

حيث يمثل b متجه برجرز بينما يمثل D المسافة بين الانخلاعين – الشكل (14 - 11)

b – التوائــم :–

بالاضافة الى الحدود الحبيبية هناك عدد من العيوب المستوية ، والاكثر شيوعا منها التوائم twins . تعتبر عملية تكوين التوائم نوعا من التغير اللدن للبلورات وتظهر في بعضها وعلى وجه الخصوص في تلك البلورات التي تنتمي الى المواد البلورية المكعبة ذات الاوجه المتمركزة (f.c.c)

عند تكوين التوائم تنشأ كمية صغيرة من الازاحة (اقل من ثابت الشبيكة) عــلى المستويات البلورية المتجاورة ، وجزء البلورة الذي يتغير بهذه الكيفية يرتبط بالبلورة الاصلية كما لوكانت بينهما مرآة مستوية فيصبح احد الجزاين صورة للجزء الاخر . اما المرآة نفسها فتمثل مستوى التوأمة – انظر الشكل 15 - 11)



الشكل (16 - 11) التوائم في البلورات

ان الجهد اللازم لاحداث عملية التوائم في البلورات يكون عادة اكبر من الجهد اللازم لاحداث الانزلاق ، وبهذا فان الانزلاق يعتبر على وجه العموم عملية تشويه اعتيادية في المعادن . فعلى سبيل المثال ، يكون جهد التوأمه اقل حساسية للحرارة مما

هو عليه جهد الانزلاق وبهذا فان التوأمة تكون هي الاكثر حدوثا عند انخفاض درجة الحرارة . هذا ويتم حدوث عملية التوأمة عن طريق : -

1- خلال عملية نمو البلورة ويدعى بالتوائم النامية growth twins او عن طريق

2- التشويه الميكانيكي كالطرق مثلا وتسمى بالتوائم المشوهة deformation twins

3- او بسبب من التغير الذي يطرأ على التركيب البلوري للمواد والناتج من عملية صهر المادة البلورية ثم اعادة تصلبها .

الاسئلة

1 - 11 ما المقصود بالبلورة المثالية ؟ وضح ذلك

2 - 11 ما تأثير وجود الشوائب على سلوك المواد (كهربائيا وميكانيكيا - - -) وضح ذلك

3 - 11 ما المقصود بالعيوب النقطية ؟ اذكر انواعها

4 - 11اشتق المعادلة(11-11)ثم بين معنى كل رمز فيها

5 - 11هل ان نظرية الانصهار تعتمد على التوليد المستمر للفجوات ام على حدوث الانزلاق ؟ وضح ذلك

6 - 11على فرض ان لديك بلورة مثالية ارسم العلاقة بين الكثافة لهذه البلورة كدالة لـ(a) اختلال فرنكل(b) اختلال شونكي

7 - 11اشتق المعادلة (17 - 11) . ثم بين معنى كل رمز فيها

8 - 11ما المقصود بـ a-الذرات الاضافية

b- العيوب الخطية

c- جهد القص

d- العيوب المركبة .

9 - 11هل ان متجه برجرز يتغير مع تغير حجم دائرة برجرز ؟ وضح ذلك

10 - 11ما المقصود بالعيوب السطحية ؟ وايهما اكثر حدوثا في البلورات ؟ وضح ذلك

11 - 11عند الحدود التوائمية تكون الزاوية بين البلورتين المتجاورتين اكبر مما هي عليه في الحدود الحبيبية على الرغم من ان طاقة التوائم تكون في حدود 0.01 الى 0.05 جول / م^2 مقارنة مع طاقة الحدود الحبيبية التي تقع ما بين 0.2-0.6 جول / م^2 - ماسبب هذا الفرق في الطاقة ؟

12 - 11احسب المسافة الفاصلة بين الانخلاعات المولدة للحدود الانحدارية اذا كانت الزاويا هي 2 في النيكل (fcc)

الفصل الثاني عشر

الموصلية المفرطة

1 - 2 المقدمة

ان معظم العناصر المعدنية والمركبات والسبائك لها خاصية التوصيل المفرط عندما تنخفض درجة الحرارة لتقترب من الصفر المطلق . ان خواص المواد في حالة التوصيل المفرط (superconducting state) تختلف كثيرا عن الحالة الاعتيادية (normal state) وذلك بسبب التغير الحاصل في سلوك الكترونات التوصيل . ولكي نفهم سبب ظهور خاصية التوصيل المفرط لابد من معرفة الموصلية الكهربائية للمواد عند درجات الحرارة الواطئة . اي دراسة تصادم الالكترونات بالفونونات وتأثيرها على عملية التوصيل الكهربائي عند درجة حرارة الصفر المطلق . ان هذه الدراسة ستؤدي الى اكتشاف ظاهرة انعدام المقاومة النوعية والتي تمثل احدى خواص الموصلات المفرطة ثم ندرس سلوك هذه الموصلات بوجود المجال المغناطيسي لنضيف خاصية اخرى تتميز بها الموصلات المفرطة هي الدايا مغناطيسية المثالية (perfect diamagnetism) .

ان الموصلات المفرطة تستخدم في المجالات التالية :

1- في صناعة الاجهزة الالكترونية ذات القدرة الواطئة ومنها مقياس شدة المجال المغناطيسي (magnetometor) والدوائر الرقمية (digital circiut) وقواطع الدائرة الكهربائية

2- في صناعة الاجهزة ذات القدرة العالية ومنها المغانيط ذات الموصلية المفرطة والتي تستخدم كثيرا في مجال البحوث بدلا من المغانيط التقليدية وكذلك تستخدم في صناعة المولدات (generator) وفي المحركات الكهربائية.

2 - 12 درجة الحرارة الحرجة

إن من اهم مزايا الموصل المفرط هو تلاشي المقاومة النوعية لتصبح قيمتها صفراً عند درجة حرارية معينة T_c تدعى درجة الحرارة الحرجة (critical temperature) وهذه تختلف من معدن الى أخر. إن أول من أكتشف هذه الظاهرة هو العالم الفيزيائي الهولندي أونس (Onnes) عام 1911 من خلال تجاربه على التوصيل الكهربائي لبعض المعادن عند درجات الحرارة الواطئة . لقد لاحظ العالم أونس انه يتعامل مع حالة جديدة للمادة تسمى حالة التوصيل المفرط تحدث عند درجة الحرارة الحرجة T_c . عند زيادة درجة الحرارة الى درجة اعلى من T_c فأن المادة تعود الى الحالة الاعتيادية .

إن ظاهرة التوصيل المفرط لا تقتصر على معادن قليلة . فهناك اكثر من 20 معدناً ذات توصيلية كهربائية مفرطة عند درجات حرارية مختلفة (لاحظ الجدول 2 - 12) .

إن بعض اشباه الموصلات لها خاصية التوصيل المفرط عند ظروف خاصة مثلاً عند تسليط ضغط عال أو عند تحضير العينة على شكل غشاء رقيق (thin film) . نلاحظ من الجدول (2 - 12) أن اعلى درجة حرارية حرجة هي 9.2 كيلفن وتعود لعنصر النيوبيوم Nb بينما اقل درجة حرجة سجلت لعنصر التنكستين W هي 0.01 كيلفن بينما ثبت ان اعلى درجة حرارية حرجة سجلت لبعض السبائك أو المركبات هي 20 كيلفن مثال ذلك Nb_3Ge وله درجة حرارية حرجه تساوي 23 كيلفن . .

الجدول (12 - 1) العناصر ذات التوصيل المفرط

H																	He
Li	Be*											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si*	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge*	As	Se*	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb*	Te*	I	Xe
Cs*	Ba*	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi*	Po	At	Rn
Fr	Ra																

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu								

Al عناصر مفرطة التوصيل

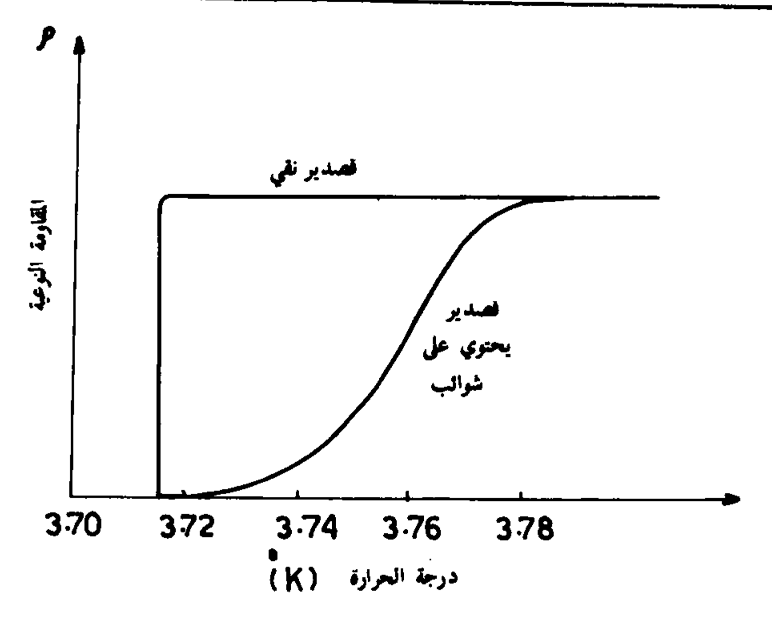
Si* عناصر مفرطة الموصلية تحت ضغط عالي اوعندما تكون على شكل اغشية رقيقة

Li معادن لم تكتشف بعد انها موصلات مفرطة

B عناصر غير معدنية

Fe عناصر معدنية ذات ترتيب مغناطيسي

إن عملية الانتقال من الحالة الأعتيادية الى حالة التوصيل المفرط لاتكون دائماً شديدة الانحدار ولكن تعتمد على نقاوة المعدن . ففي حالة كون المعدن نقياً واحادي التبلور فأن مدى درجات الحرارة التي عندها تهبط قيمة المقاومة الى الصفر قليلة جداً. الشكل (1 - 12) يوضح العلاقة بين المقاومة النوعية ودرجات الحرارة لعنصر القصدير Sn. نلاحظ ان مدى درجة حرارة الأنتقال هي 10^{-3} كيلفن عندما يكون عنصر القصدير نقيا جدا واحادي التبلور. بينما يصبح المدى 10^{-1} كيلفن بل اكثر من ذلك عندما يكون المعدن كثير الشوائب . ولمعرفة ما اذا كانت قيمة المقاومة لموصل مفرط تساوي صفرا أو ذات قيمة صغيرة جداً ، لابد من إجراء التجارب التي من خلالها يمكن قياس التيار مع الزمن . من الممكن اجراء هذه التجربة عن طريق مرور التيـــار .



الشكل (1 - 12) تأثير الشوائب على درجة حرارة الانتقال في عنصر القصدير

بواسطة الحث المغناطيسي (magnetic induction) ، خـلال حلقـة مغلقـة من معدن مفرط الموصلية . ولو كانت الحلقة في الحالة الاعتيادية فأن قيمة التيار تتلاشى بصورة سريعة بعد قطع مصدر التيار وذلك بسبب مقاومة الحلقة . عنـــدمـا تنخفض درجة حرارة الحلقة الى درجة حرارية اقل من درجة الحرارة الحرجة T_c

فان التيار يبقى بنفس قيمته الاولى طول فترة التجربة وحتى لفترة تزيد على السنـــــة . لقد لوحظ من هذه التجربة ان اعلى قيمة للمقاومة هي اقل من 10^{-25} أوم – متر ولكي يتم اثبات ان المقاومة تساوي صفراً ، لابد من إطالة فترة القياس الى زمن غير محدود .

3 - 12 المجال الحرج

يتميز الموصل المفرط بخاصية اخرى ، إضافة الى كون مقاومته تساوي صفراً بالنسبة للتيار المستمر ، هي تحوله من حالة التوصيل المفرط الى الحالة الاعتيادية وذلك بتسليط مجال مغناطيسي عالي يسمى المجال الحرج (critical field). إن المجال الحرج B_c يعتمد على نوعية المادة المصنوع منها الموصل ودرجة الحرارة . إن قيمة المجال الحرج B_c تصبح صفراً عند درجة الحرارة الحرجة T_c وتزداد قيمتة بأنخفاض درجة الحرارة. لقد وجد عمليا ان تغير B_c مع درجات الحرارة يتبع العلاقة التالية

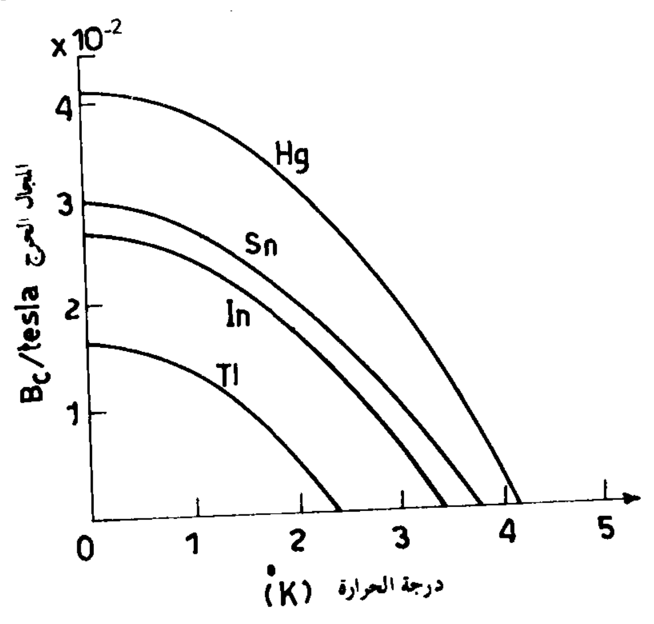
$$B_c = B_o \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \qquad \ldots (12 - 1)$$

إن قيمة المجال الحرج B_c تزداد لتصبح قيمته ثابتة وتساوي B_o عندما تصل درجة الحرارة الصفر المطلق T=0K كما هو موضح فـي الشكـــل (2 - 12) . نلاحظ من الشكل (2 - 12) ان قيمة B_o تزداد بأرتفاع درجة الحرارة الحرجة T_c .

ان الجدول (2 - 12) يمثل درجات الحرارة الحرجة T_c والمجال الحرج B_c لبعض العناصر ذات توصيلية مفرطة . في بعض الأحيان ليس من الضروري ان نسلط مجالاً مغناطيسياً خارجياً لغرض إزالة خاصية التوصيل المفرط ولكن عندما تتجاوز قيمة التيار المار في حلقة مصنوعة من مادة ذات توصيلية مفرطة قيمة التيار الحرج (critical current) فأن المادة تتحول الى الحالة الاعتيادية . إن قيمة التيار الحرج (يمكن ان يكون 100 أمبير في سلك سمكه 1 ميلمتر) ويعتمد ذلك على طبيعة المادة وشكلها الهندسي وكذلك على قيمة المجال المغناطيسي الناتج عن مرور التيار . فأذا تجاوزت قيمة المجال الناتج عن مرور تيار في موصل مفرط القيمة الحرجة للمجال B_c، فأن المادة تكون في الحالةلأعتيادية. إن تحديد قيمة التيار المار في موصل مفرط تعد من احدى المشاكـل الصناعيـــة في توليـــد مجال مغنـــاطيســـي عـــال .

الجدول (12 . 2) قيم T_c وH_c للعناصر ذات التوصيلية المفرطة .

EMENT		T_c (K)	H_c (GAUSS)
Al		1. 196	99
Cd		0. 56	30
Ga		1. 091	51
Hf		0. 09	–
Hg	α(rhomb)	4.15	411
	β	3. 95	339
In		3. 40	293
Ir		0. 14	19
La	α(hcp)	4. 9	798
	β (fcc)	6. 06	1096
Mo		0. 92	98
Nb		9. 62	1980
Os		0. 655	65
Pa		1. 4	–
Pb		7. 19	803
Re		1. 698	198
Ru		0. 49	66
Sn		3. 72	305
Ta		4. 48	830
Tc		7. 77	1410
Th		1. 368	162
Ti		0. 39	100
Tl		2. 39	171
U	α	0. 68	–
	γ	1. 80	–
V		5. 30	1020
W		0. 012	1
Zn		0. 875	53
Zr		0. 65	47



الشكل (12 - 2) العلاقة بين المجال الحرج B_c ودرجة الحرارة لبعض العناصر.

12 - 4 ظاهرة مازنر

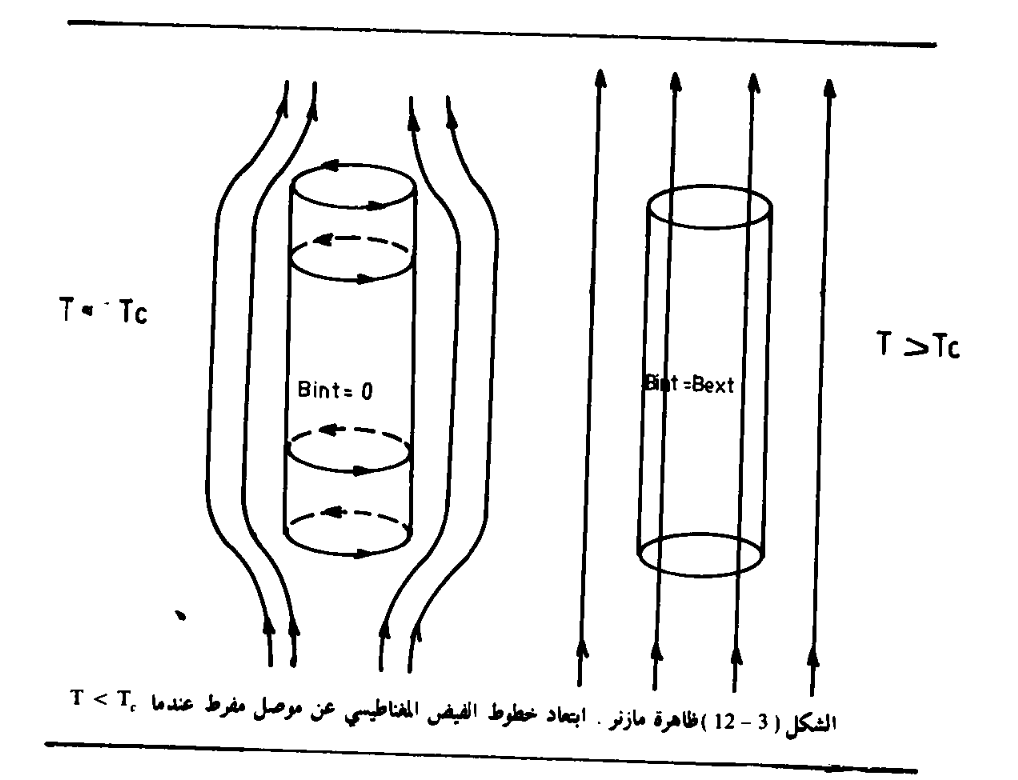
لقد لاحظ العالم الفيزيائي الالماني مازنر Messiner انه عندما تكون المادة ذات التوصيل المفرط في مجال مغناطيسي فان خطوط الفيض المغناطيسي (magnetic flux) تبتعد كليا عن الموصل عند تبريد المادة الى درجة حرارية اقل من T_c وتدعى هذه الظاهرة بظاهرة مازنر (Messiner effect) . يمكن فهم هذه الظاهرة على اساس ان عملية التحول (بوجود المجال المغناطيسي) من الحالة الاعتيادية الى حالة التوصيل المفرط تكون مصحوبة بتوليد تيارات سطحية كافية لالغاء المجال المغناطيسي داخل العينة كما هو موضح في الشكل (3 - 12)

ان المجال المغناطيسي داخل المادة في الحالة الاعتيادية يمكن كتابته على الشكل التالي

$$B_{int} = \mu_0 B + \mu_0 m_r \quad \dots (12-2)$$

او

$$B_{int} = B_{ext} + \mu_0 m_r \quad \dots (12-3)$$



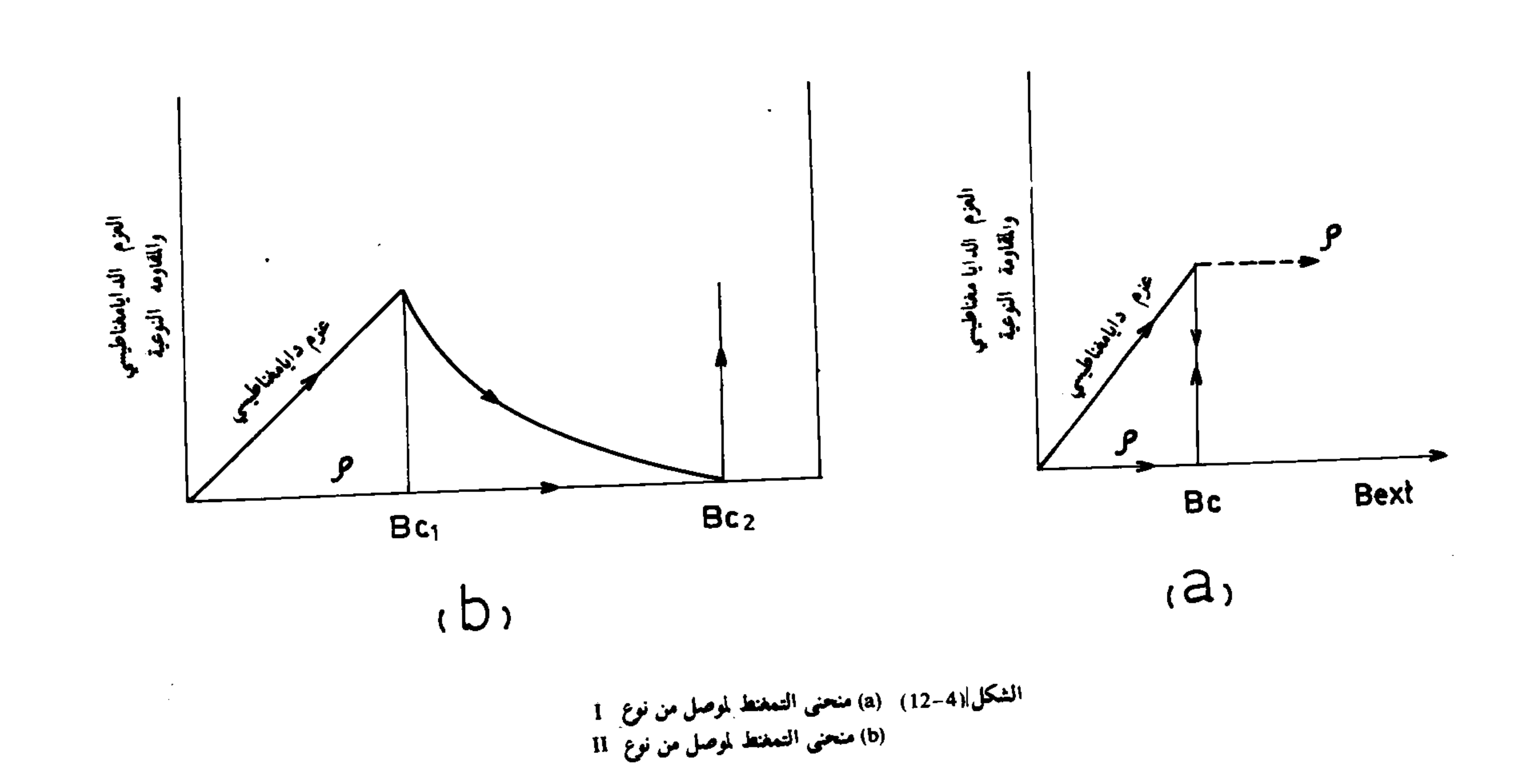
الشكل (3 - 12) ظاهرة مازنر . ابتعاد خطوط الفيض المغناطيسي عن موصل مفرط عندما $T < T_c$

حيث B_{ext} المجال المغناطيسي الخارجي المسلط على الموصل، m_v العزم المغناطيسي لوحدة الحجم . لما كانت $B_{int} = 0$ لموصل مفرط ، فان

$$m_v = - B_{ext} / \mu_0 \quad \ldots (12-4)$$

وعليه فان الموصل المفرط له تاثير كما لو كان لديه عزم مغناطيسي معاكس الى المجال المغناطيسي المسلط ولهذا فيمكن اعتبار ان المادة ذات دايا مغناطيسية مثالية .

هناك نوعان من الموصلات ذات التوصيلية المفرطة يعتمدان على الطريقة التي يحدث بها الانتقال من حالة التوصيل المفرط الى الحالة الاعتيادية عندما تكون قيمة المجال المسلط اكبر من قيمة المجال الحرج B_c . فالنوع الاول يدعى موصل مفرط من نوع I (type I) ، فعندما تتجاوز قيمة المجال المسلط المجال الحرج B_c فان الموصل يتحول كلياً الى الحالة الاعتيادية وبذلك يتمكن المجال الخارجي من اختراق الموصل وتصبح قيمة العزم المغناطيسي صفراً ، اي $B_{int} = B_{ext}$ كما هوموضح في الشكل(12 - 4a).



الشكل (4-12) (a) منحنى التمغنط لموصل من نوع I
(b) منحنى التمغنط لموصل من نوع II

ان معظم المعادن ذات الموصلية المفرطة هي من نوع I . اما النوع الثاني فيدعى موصل مفرط من نوع II (type II) ويتميز بوجود قيمتين للمجال الحرج ، B_{c2} وتمثل اعلى قيمة للمجال و B_{c1} اقل قيمة له . فعندما تتجاوز قيمة المجال المسلط اعلى قيمة للمجال الحرج B_{c2} ($B_{c2} > B_{c1}$) فان الموصل يتحول كلياً الى الحالة الاعتيادية وبذلك يتمكن المجال الخارجي من اختراق الموصل . اما اذا كانت قيمة المجال المسلط اعلى من B_{c1} واقل من B_{c2} فهناك اختراق جزئي للموصل وبذلك يكون الموصل في حالة جديدة تسمى الحالة المختلطة (mixed state) كما هو موضح في الشكل (12 – 4b) . ان معظم السبائك هي من نوع II وكذلك بعض المعادن . مثل النيوبيوم والتكنيتوم والفاديوم . ان القيمة النموذجية للمجال الحرج في موصل من نوع I حوالي 10^2 كاوس بينما قيمة المجال الحرج في موصل من نوع II حوالي 10^5 كاوس وهذا يجعل استعمال موصل من نوع II مفضلاً في صناعة المغانيط ذات المجال العالي .

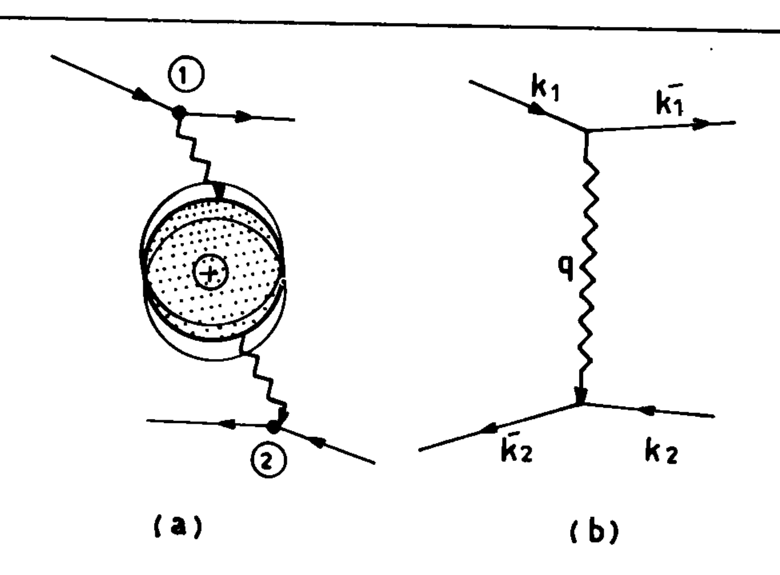
12 – 5 نظرية التوصيل المفرط

ان النظرية الحديثة للتوصيل المفرط وضعت من قبل كل من الفيزيائيين باردن (Bardeen) وكوبر (Cooper) وشريفر (Schrieffer) عام 1957 وقد سميت بنظرية BCS نسبة الى الحروف الاولى من اسماء هؤلاء العلماء . لقد لاقت هذه النظرية نجاحاً كبيراً لانها استطاعت تفسير كثير من الظواهر التي تتميز بها الموصلات المفرطة مثال ذلك انعدام المقاومة وظاهرة مازنر — — — الخ . ان هذه النظرية بنيت على اساس النظرية الكمية ولغرض مناقشتها لابد من استخدام ميكانيك كم متقدم ورياضيات عالية خارج نطاق هذا الكتاب ولذلك سوف نكتفي بذكر الشرح المبسط لهذه النظرية .

ان مقاومة المعادن في درجات الحرارة الواطئة وكما هو معلوم ، هي نتيجة لتصادم الكترونات التوصيل مع ذرات الشوائب . وليس هناك وسيلة يمكن بواسطتها تحوير نظرية الالكترونات الحرة لكي نقلل هذا التصادم مع ذرات الشوائب لتصبح قيمة المقاومة صفراً وذلك لان الشوائب موجودة دائماً وبذلك تتصادم بها الالكترونات المسؤولة عن التوصيل الكهربائي . وعليه لابد من استخدام نظرية اخرى تفسر سبب انعدام المقاومة في الموصلات المفرطة . ان هذه النظرية مبنية على اساس تجمع الالكترونات على شكل ازواج (pairs) بواسطة قوة جذب من نوع خاص وبذلك

يمكن تفسير ظاهرة انعدام المقاومة على اساس ان هذه الازواج من الالكترونات يمكن ان تتصادم بعد تزويدها بطاقة كافية لفصلها عن بعضها وتوليد الكترونين منفردين. ولكن عند درجات الحرارة الواطئة لا يمكن تزويد هذه الالكترونات بمثل هذه الطاقة وبذلك تمر هذه المجاميع من ازواج الالكترونات دون ان تتصادم مع الشوائب .

ان الالكترونات تتنافر بعضها مع البعض الاخر نتيجة للقوى الكهروستاتيكية فلابد من وجود طريقة غير مباشرة لفهم التأثير المتبادل بين الالكترونات والذي ينتج عنه قوة جذب بدلاً من قوة تنافر . يمكن فهم هذه الطريقة على اساس استجابة الايونات الموجبة في البلورة للالكترونات المارة من قربها . هناك قوة جذب ولفترة وجيزة جداً بين الايون الموجب والالكترون المار من قربه (الكترون 1 في الشكل 5a - 12) والذي ربما يحدث عنه تحوير بسيط في اهتزاز ذلك الايون . ويمكن ان يؤثر هذا الايون على الكترون اخر (الكترون 2 في الشكل(5a - 12) ماراً من قربه ويجذبه نحوه .



الشكل (5 - 12) (a)التأثير المتبادل بين الكترونين
(b) تكون زوج الكترون

ان نتيجة هذين التفاعلين هو ظهور قوة جذب بين الالكترونين ولا يمكن حدوث مثل هذا التجاذب لولا وجود الايون الموجب . باستخدام نظرية المجال (field theory)

فان التاثير المتبادل هو نتيجة لتبادل فونون افتراضي (virtual phonon) ذي طول موجي q بين الالكترونين . يمكن استخدام المعادلة التالية لتوضيح ذلك

$$\vec{k}_1 - \vec{q} = \vec{k}'_1 \quad \dots (12-5)$$

و

$$\vec{k}_2 + \vec{q} = \vec{k}'_2 \quad \dots (12-6)$$

حيث k_1، k_2 يمثلان متجهات الموجة للالكترون الاول والثاني على التوالي . وعليه فان

$$k_1 + k_2 = k'_1 + k'_2 \quad \dots (12-7)$$

وهذا يعني ان المتجه النهائي لزوج الالكترون يكون محفوظاً (لاحظ الشكل 12 - 5b)

لقد اشار العالم الفيزياوي كوبر عام 1956 انه في حالة وجود قوة جذب بين الالكترونات ، مهما كانت ضعيفة ، فان الحالة الدركية في درجة حرارة الصفر المطلق تحتوي على الكترونات متجمعة على شكل ازواج . هذه الأزواج من الالكترونات يطلق عليها في بعض الاحيان ازواج كوبر (Cooper pairs)

12 - 6 الخواص الحرارية للموصل المفرط

في هذا البند نشتق العلاقة التي تربط تغير اللاترتيب (entropy) والحرارة النوعية (specific heat) للحالة الأعتيادية وحالة التوصيل المفرط مع تغير المجال الحرج B_c عند تغير درجات الحرارة . عندما يكون للمادة عزم مغناطيسي m_r لوحدة الحجم فأن الطاقة الحرة لموصل مفرط في مجال مغناطيسي B (عندما $B< B_c$) هي

$$G_s = U - TS - V \int_0^B m_r \, dB. \quad \dots (12-8)$$

حيث U تمثل الطاقة الداخلية و S حالة اللاترتيب . نفترض إن المادة على شكل سلك طويل ورقيق ومحوره بأتجاه يوازي المجال المغناطيسي المسلط B وان نوعية الموصل المفرط من نوع I . وعندما تكون قيمة المجال المسلط B أقل من المجال الحرج B_c فأن العزم المغناطيسي يأخذ شكل المعادلة (4 - 12) .

$$m_r = - B / \mu_0$$

وبالتعريض عن قيمة m_r في المعادلة (8 - 12) وبتكامل المقدار نحصل علـى :

$$G_s(B_c) = G_s(0) + \frac{1}{2} V B_c^2 / \mu_0 \qquad \ldots (12-9)$$

حيث $G_s(0)$ هي الطاقة الحرة لموصل مفرط عندما B=0و $G_s(B_c)$ هي الطاقة الحرة للموصلعند الأنتقال من حالة التوصيل المفرط الى الحالة الأعتيادية وبذلك فأن الفرق في الطاقة الحرة بين الحالتين هــو.

$$\frac{1}{2} V B_c^2 / \mu_0 \qquad \ldots (12-10)$$

يمكن تعريف اللاترتيب من العلاقة

$$S = - \frac{\partial G}{\partial T}$$

وبذلك فأن الفرق في اللاترتيب بين الحالتين :

$$S_n - S_s = - (VB_c / \mu_0) \left(\frac{dB_c}{dT} \right) \qquad \ldots (12-11)$$

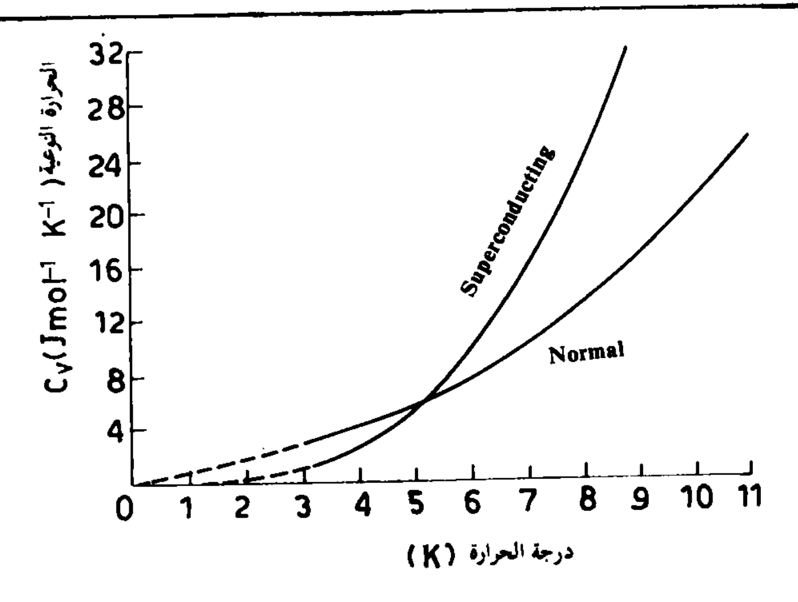
نلاحظ من الشكل (2 - 12) ان $\frac{dB_c}{dT}$ هي دائماً ذات قيمة سالبة وبذلك فأن اللاترتيب للحالة المفرطة هوأقل من الحالة الأعتيادية وهذا يعني ان الترتيب (ordering) في الحالة المفرطة هو أكبر مما عليه في الحالة الأعتيادية . وحسب القانون الثالث للثرموداينمك فأن حاصل فرق اللاترتيب للحالتين ($S_s - S_n$)يجب ان يساوي صفراً عند درجة حرارة الصفرالمطلق . وبذلك فأن معدل تغيرالمجال الحرج مع درجات الحرارة dB_c / dT يجب ان يساوي صفرا عند درجات الحرارة الواطئة جدا وهذا ما يوضحه الشكل (2 - 12) . ان الحرارة النوعية للمعادن الأعتياديةعند درجات الحرارة الواطئة تأخذ الشكل .

$$C_r = AT + BT^3 \qquad \ldots (12-12)$$

حيث AT هو مساهمة الكترونات التوصيل للحرارة النوعية وتأثيره واضح عند درجات الحرارة الواطئة و BT^3 هو نتيجة اهتزازات البلورة . وعند درجات حرارة أقل من الدرجة الحرجة ($T < T_c$) في الموصلات المفرطة فأن سلوك المعدن يختلف عن سلوكه في الحالة الاعتيادية حيث تزداد الحرارة النوعية بشكل مفاجىء (في حالة المجال المغناطيسي يساوي صفراً) لتتجاوز الحرارة النوعية عندما يكون نفس المعدن في الحالة الاعتيادية وبذلك لابد من تبديل الحد الخطي AT الذي تساهم به

الالكترونات للحرارة النو عية بحد اخر هو $\exp(-\Delta / K_B T)$ ليتلاشى بصورة سريعة عند درجات الحرارة الو طئة كما هو موضح في الشكل (6 - 12) . هنا 2Δ تمثل طاقة الفجوة بين الحالة التي تكون فيها الالكترونات متجمعة على شكل ازواج والحالة التي تكون فيها الالكترونات منفرده (unpaired) . ويمكننا ايجاد تعبير رياضي لفرق الحرارة النوعية $C_s - C_n$ لوحدة الحجم بين حالة التوصيل المفرط والحالة الأعتيادية وذلك بأستخدام المعادلة (11 - 12) والتعبير الرياضي للحرارة النوعية $T\frac{dS}{dT}$ وبذلك فان :

$$C_s - C_n = (T/\mu_0)\left[B_c \frac{d^2B_c}{dT^2} + \left(\frac{dB_c}{dT}\right)^2\right] \qquad \ldots (12\text{-}13)$$



الشكل (6 - 12)الحرارة النوعية لعنصر النيوبيوم في الحالة الاعتيادية وحالة التوصيل المفرط

وعند الدرجة الحرجة T_c ($B = 0$) هناك انقطاع في منحني الحرارة النوعية وان المعادلة (13-12) تأخذ الشكل التالي :

$$C_s - C_n = (T_c/\mu_0)(dB_c/dT)^2\big|_{T_c} \qquad \ldots (12\text{-}14)$$

وهذه كمية موجبة . وعند درجة حرارة $T<T_c$ فأن فرق الحرارة النوعية تصبح سالبة وذلك لان d^2B_c/dT^2 كمية سالبة وان dB_c/dT تقترب من الصفر عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق .

(4 - 12) عمق الاختراق

ان الاخوين لندن (H. London , F. London) اول من استخدم التقدير الكمي لدراسة ظاهرة مازنر حيث المعادن في حالة التوصيل المفرط لاتسمح بنفوذ خطوط الفيض المغناطيسي الى داخلها . ان تحليلهم استند على نموذج السائلين (two - fluid model) لكل من كورتر (Gorter) وكازامير (Gasimir) . ان اهم فرضية في هذا النموذج هو انه في موصل مفرط وعند درجة حرارة $T < T_c$ فان جزءا مقـــداره $n_s(T)/n$ من العدد الكلي لالكترونات التوصيل يستطيع ان يساهم في التيـــار المفرط (supercurrent) . ان المقدار $n_s(T)$ يدعى كثافة الكتـرونات التوصيل المفرط ويقترب من الكثافة الالكترونية الكلية n عندما تنخفض درجة الحرارة لتصبح اقل من الدرجة الحرجة T_c . وتنخفض قيمة المقدار $n_s(T)$ الى الصفر عندما ترتفع درجة الحرارة لتساوي T_c . نفترض ان هناك مجالا كهربائيا لحظياً عبر موصل مفرط . ان حركة الالكترونات الخارقة تتمثل بالمعادلة التالية

$$m \frac{d\vec{v}_s}{dt} = -e\vec{E} \qquad \dots (12-15)$$

نلاحظ من هذه المعادلة ان القوة الوحيدة التي تؤثر على هذا النوع من الالكترونات (الكترونات التوصيل المفرط) هي القوة الناتجة عن المجال الكهربائي . اما قوة التصادم فليست ظاهرة في المعادلة اعلاه وذلك لان الكترونات التوصيل المفرط لاتتصادم . ان كثافة التيار الناتجة عن الالكترونات التوصيل المفرط هي

$$\vec{J}_s = -e\,\vec{v}_s\,n_s \qquad \dots (12-16)$$

بدمج المعادلتين (15 - 12) , (16 - 12) نحصل على

$$\frac{d}{dt}\vec{J} = \frac{n_s e^2}{m}\vec{E}$$

او

$$\vec{J} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} \qquad \dots (12-17)$$

يمكننا الان حساب مقدار اختراق المجال للموصل وحسب الطريقة التاليــــة : نفترض ان الحالة مستقرة فان $\vec{J}_s = 0$ وبذلك ومن المعادلة (17 - 12) فان المجال يصبح صفرا او بمعنى اخر فان فرق الجهد عبر موصل مفرط يساوي صفرا . وفي هـذه الحالة فان الالكترونات الاعتيادية لاتستطيع ان تمر مطلقا عبر الموصل وان التيار المــار هو نتيجة مرور الكترونات التوصيل المفرط . وباستخدام الحالة اعلاه($\vec{E} = 0 , \vec{J}_s = 0$) مع معادلة ماكسويل

$$\dot{\vec{B}} = - \vec{\nabla} \times \vec{E} \qquad \dots (12-18)$$

نحصل على

$$\dot{\vec{B}} = 0 \qquad \dots (12-19)$$

ان المعادلة(19 - 12) تؤكد بان المجال للحالة المستقرة يكون ثابتا وهذا يناقض ظاهرة مازنر . ان المعادلة(19 - 12)تنص على ان B ثابتة بغض النظر عن درجة الحرارة بينمــا ظاهرة ما زنر(البند 3 - 12) تشير الى انه بارتفاع درجة الحرارة فان الفيض المغناطيسي ينفذ من خلال المادة عندما $T = T_c$. وعليه لابد من ادخال بعض التعديــلات على المعادلات اعلاه لنحصل على النتيجة المطلوبة . بالتعويض عن قيمة $\vec{E}$ (المعادلة (17 - 12) في المعادلة (18 - 12) نحصل على

$$\dot{\vec{B}} = - \frac{m}{n_s e^2} \vec{\nabla} \times \dot{\vec{J}}_s \qquad \dots (12-20)$$

ان هذه المعادلة لاتجدي نفعا وذلك لان $\ddot{B} = 0$ ولتصحيحها فقد اعاد لندن صياغتها لتصبح

$$\vec{B} = - \frac{m}{n_s e^2} \vec{\nabla} \times \vec{J}_s \qquad \dots (12-21)$$

وتسمى العلاقة(21 - 12)بمعادلة لندن

يمكن كتابة معادلة ماكسويل بدلالة $\vec{J}_s$ فقط. حيث

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_s \qquad \dots (12-22)$$

وبأخذ دوران (curl) طرفي المعادلة نحصل على

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} = -\nabla^2 \vec{B} = \mu_0 \vec{\nabla} \times \vec{J}_s \qquad \ldots (12-23)$$

ونعوض عن $\vec{\nabla} \times \vec{J}_s$ من المعادلة (21 - 12) في المعادلة (23 - 12) لنحصل

$$\vec{\nabla}^2 \vec{B} = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m} \vec{B} \qquad \ldots (12-24)$$

وبنفس الطريقة نحصل على :

$$\vec{\nabla}^2 \vec{J}_s = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m} J_s \qquad \ldots (12-25)$$

ولحل المعادلتين (24 - 12) , (25 - 12) . نفترض شكلا هندسيا فبسطا شبه غير محدود (semi - infinite) يمتد على طول الجزء الموجب للمحور x. عند تسليط مجال مغناطيسي خارجي (B_{ext}) يوازي سطح هذا الشكل الهندسي وباتجاه المحور z فان حل المعادلة (24 - 12) عندما $x > 0$ هو :

$$\vec{B}_z = \vec{B}_{ext} \exp\left(- \frac{x}{\lambda} \right) \qquad \ldots (12-26)$$

حيث

$$\lambda = \left(\frac{m}{\mu_0 n_s e^2} \right)^{1/2} \qquad \ldots (12-27)$$

ان المعادلة (26 - 12) توضح بان المجال يقل اسياً عندما ينتقل من سطح الموصل الى داخله . وعليه فان المجال يساوي صفرا داخل موصل سميك وهذا يتفق مع ظاهرة مازنر. يمكننا ان نستنتج من المعادلة (26 - 12) ما يلي :

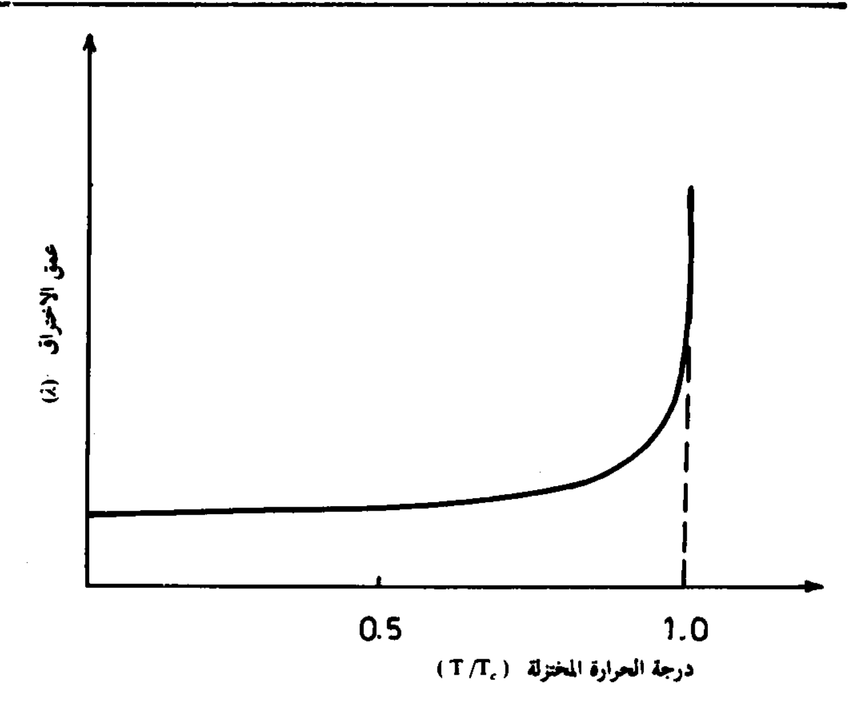
a- ان فيض المجال يستطيع ان ينفذ الى مسافة محدودة عند السطح وتسمى المسافة بعمق الاختراق (penetration depth) وتساوي λ وتتراوح قيمتها بين $10^3 - 10^2$ انكستروم وعليه فان مقدار نفوذ المجال يزداد عندما تكون المادة على شكل غشاء رقيق سمكه يساوي عمق الاختراق او اقل منه وبذلك لايتميز الموصل بخاصية الدايا مغناطيسية المثالية .

b- ان عمق الاختراق λ يتغير مع درجات الحرارة حيث تزداد قيمة λ بارتفاع درجات الحرارة لتصبح ما لانهاية عندما $T = T_c$ وذلك لان المادة تتحول

الى الحالة الاعتيادية وعليه فان المجال يخترق المادة كليا كما هو موضح في الشكل (7 – 12) . لقد وجد عمليا بان λ تأخذ الصيغة التالية :

$$\lambda = \lambda_0 [1 - (T / T_c)^4]^{-1/2}$$

حيث λ_0 عمق الاختراق عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق .



الشكل (7 – 12) تغير λ مع درجات الحرارة

c – ان الاستنتاج الثالث لنظرية لندن هو ان التيار الكهربائي في موصل مفرط يجري قرب سطح الموصل وليس بداخله . ان حل المعادلة (25-12) للتيار يكون بنفس طريقة حل المعادلة (24 – 12) للمجال المغناطيسي . ان التيار $\vec{J}_s$ يسري باتجاه المحور y

$$\vec{J}_y = - \left(\frac{n_s e^2}{\mu_0 m} \right)^{1/2} \vec{B}_z = - \vec{J}_s(0) e^{-x/\lambda} \qquad \ldots (12-28)$$

وهذا يعني ان التيار يتناقص اسياً عندما ننتقل من سطح الموصل الى داخله ، اي ان التيار محصور قرب سطح الموصل . اذا كان الموصل على شكل اسطواني فان التيار يجري

على سطح الاسطوانة فقط وهذا يختلف عن الموصل الاعتيادي حيث التيار يمر بشكل منتظم خلال العينة كلها . وبذلك فان ظاهرة مازنرهي نتيجة لهذا التيار السطحي الذي يحفظ الموصل من المجال المغناطيسي وبذلك يكون الموصل ذا خاصية دايامغناطيسية مثالية او بمعنى اخر ، ان المجال الناتج عن التيارات السطحية يعاكس كلياً المجال المغناطيسي الذي ينفذ الى داخل الموصل .

12 - 8 تكمم الفيض المغناطيسي

نفترض حلقة من مادة مفرطة التوصيلية نصف قطرها الداخلي R ومقدار الفيض المغناطيسي المحصور داخلها يساوي ϕ كما هوموضح في الشكل (8-12). ان هذا الفيض ناتج عن التيار الدائم (persitent current) والذي يسري في السطح الداخلي للحلقة . وبما ان ازواج الكترونات التوصيل في موصل مفرط لا تتصادم فعليه هناك توافق في الطور في اي نقطة من نقاط المحيط الداخلي للمادة بغض النظر عن عدد المرات التي تدور بها هذه الازواج وعليه فان الطور ثابت في اي نقطة . وبذلك فان تكامل الطور حول المحيط الداخلي يجب ان يساوي (عدد صحيح X 2π) و

$$\oint_R \vec{k} \cdot \vec{d}l = 2\pi n \qquad \ldots (12-29)$$

حيث $\vec{k}$ تمثل متجه الموجة لزوج الالكترون و n عدد صحيح . كما هومعروف ، ان زخم الالكترون الحر هو حاصل ضرب متجه الموجة وثابت بلانك plank constant اي

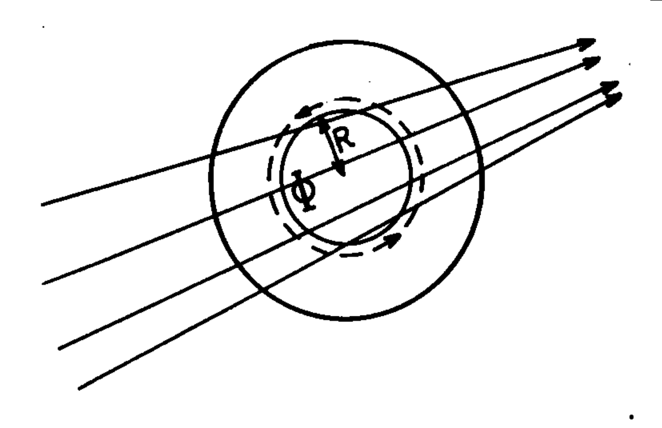
$$\hbar \vec{k} = m\vec{v} \qquad \ldots (12-30)$$

اما في حالة وجود المجال المغناطيسي فان المعادلة (30-12) تاخذ الصيغة التالية :

$$\hbar \vec{k} = m\vec{v} + e\vec{A}$$

حيث $\vec{A}$ متجه الجهد للمجال $\vec{B}$ ويعرف بالشكل التالي :

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$



الشكل (8 - 12) تكمم الفيض المغناطيسي

وعند تطبيق المعادلة(30-12)لزوج الالكترون فان

$$\hbar \vec{k} = 2m\,\vec{v} + 2e\,\vec{A} \qquad \ldots (12-31)$$

ان كثافة التيار $\vec{J}_s$ تاخذ الصيغة التالية

$$\vec{J}_s = n_s e \vec{v}$$

حيث n_s كثافة ازواج الالكترونات ، وعليه فان $\vec{k}$ تصبح

$$\vec{k} = \left(\frac{1}{\hbar} \right) \left(\frac{2m\vec{J}_s}{n_s e} \right) + \left(\frac{2e}{\hbar} \right) \vec{A} \qquad \ldots (12-32)$$

وبتكامل المقدار وباستخدام المعادلة (29 - 12) نحصل على :

$$\oint_R \vec{k}.\,d\vec{l} = (2m / n_s e \hbar) \oint_R \vec{J}_s.\,d\vec{l} + \left(\frac{2e}{\hbar} \right) \oint \vec{A}.\,d\vec{l} = 2\pi n$$

$$\ldots (12-33)$$

وباستخدام نظرية ستوك (Stoke's theorem)

$$\int \vec{A}.\,d\vec{l} = \int \vec{\nabla} \times \vec{A}.\,d\vec{S} = \int \vec{B}.\,d\vec{S} = \phi$$

نحصل على

$$2m / (n_s e \hbar) \oint_R \vec{J}_s . \vec{dl} + \left(\frac{2e}{\hbar} \right) \int \vec{B} . d\vec{S} = 2\pi n \qquad \ldots (12-34)$$

او

$$m / (n_s e^2) \oint_R \vec{J}_s . \vec{dl} + \phi = n (h / 2e)$$

وبما ان التيار يسري قرب سطح الموصل فقط (البند 6 - 12)، فان

وعليه فان

$$\oint \vec{J}_s . \vec{dl} = 0$$

$$\phi = \frac{nh}{2e} = n \phi_0$$

اي ان الفيض داخل حلقة من موصل مفرط هي كمية مكممة بوحدة $\phi_0 = \frac{h}{2e}$ وتساوي $2{\cdot}07 \times 10^{-15}$ وبر.

وقد تم تحسس هذا المقدار بواسطة مجسات مغناطيسية حساسة ويشير هذا الرقم الى ان حاملات التيار في موصل مفرط هي ازواج الالكترونات وليست الكترونات مفردة

الاسئلة

12-1 اذا كان لديك كتلة من القصدير (Sn) حجمها 1 سم^3 جد ما يلي :

a الفرق في الطاقة الحرة (ΔG) بين الحالة الاعتيادية وحالة التوصيل المفرط عند درجة الصفر المطلق

b الفرق في الحرارة النوعية بين الحالة الاعتيادية وحالة التوصيل المفرط عند درجة الحرارة الحرجة .

[ملاحظة : لحل هذه المسالة استخدم الشكل (2 - 12)]

12-2 a وضح لماذا تبرد المواد عندما تتلاشى خاصية التوصيل المفرط عند تسليط مجال مغناطيسي خارجي

b عينة من القصدير معزولة حراريا وعند درجة حرارية 2 كيلفن وفي داخل مجال مغناطيسي اكبر من المجال الحرج . احسب الدرجة الحرارية النهائية للعينة (اهمل مساهمة اهتزازات الشبيكة للحرارة النوعية) . [استخدم المعلومات التالية للقصدير :-

الكثافة تساوي 7300 كغم /م^3 والحرارة النوعية الالكترونية تساوي γT

حيث γ تساوي 1.75×10^{-3} جول غم / مول كيلفن والوزن الذري يساوي 119)

12 - 3 جد النسبة بين الموصلية الحرارية thermal conductivity للحالة الاعتيادية وحالة التوصيل المفرط عند درجة حرارة 10^{-2} كيلفن لشريط من الرصاص الملدن سمكه 0.1 ملم ومقاومته النوعية الكهربائية في الحالة الاعتيادية 2×10^{-9} اوم- متر . [استخدم المعلومات الاتية للرصاص سرعة الصوت = 2000 م/ ثا وكثافة الرصاص تساوي 11300 كغم / م^3 ودرجة حرارة ديباي تساوي 108 كيلفن)

12-4 ان الجدول التالي يوضح قيم الحرارة النوعية للحالة الاعتيادية C_n وحالة التوصيل المفرط لعنصر القصدير .

C_n ملي جول / مول - كيلفن	C_s ملي جول / مول - كيلفن	T (كيلفن)
8·29	10·39	2·48
5·10	5·01	1·91
3·89	3·03	1·62
3·31	2·10	1·46
2·62	1·14	1·24
2·18	0·65	1·08

جد قيم C_{es} الناتجة عن مساهمات الالكترونات للحرارة النوعية لحالة التوصيل المفرط ثم ارسم العلاقة بين $1 / T$, $\log C_{es}$
ما هي المفاهيم التي تستطيع استنتاجها من هذا الرسم ؟

5 - 12 اذا علمت ان عمق الاختراق λ للزئبق (Hg) يساوي 75 نانومتر عند درجة حرارة 3·5 كيلفن . جد

a عمق الاختراق عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق .

b كثافة الكترونات التوصيل n_s عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق .

6 - 12 ملف مصنوع من مادة مفرطة التوصيل للكهربائية ومبرد في درجة حرارة سائل الهليوم طوله 15 سم وقطره 3 سم وعدد لفاته يساوي 20000 لفة . بزيادة قيمة التيار المار في الملف الى 40 امبير فان الملف قد تحول الى الحالة الاعتيادية . جد حجم سائل الهليوم المبخر نتيجة الحرارة المتولدة في الملف .
[الحرارة الكامنة لسائل الهليوم 2·5 جول/سم^3]

7 - 12 حلقة رقيقة من مادة مفرطة التوصيل الكهربائي قطرها الداخلي 1 سم وان مقدار الفيض المحصور في مركزها $10\,\phi_0$.واذا علمت ان عمق الاختراق 50 نانومتر . جد قيمة التيار الدائم الذي يسري في الحلقة [استخدم العلاقة التالية لايجاد محاثة الحلقة .

$$L = \mu_0 R \ln (8R / r)$$

حيث R نصف قطر الحلقة و r نصف قطر سلك المادة الموصلة وان $R >> r$]

المراجع العربيـة

مفاهيم في الفيزياء الحديثة ... ترجمة . د . منعم مشكور - والسيد شاكر جابر شاكر جامعة الموصل -١٩٨٠

الحرارة والديناميكية ترجمة .د. محسن سالم رضوان - دار ماكروهل للنشر - جمهورية مصر العربية /القاهرة -١٩٨٢

الخواص الكهربائية والمغناطيسية للمواد - تأليف .د. وكاع فرمان الجبوري .د.فهر غالب حياتي / جامعة الموصل -١٩٨٥

البنية والتاصر في كيمياء الحالة الصلبة -ترجمة .د.عصام جرجيس سلومي جامعة الموصل -١٩٨٣

فيزياء الحيود - تأليف .د. سامي مظلوم صالح / الجامعة التكنولوجية - بغداد -١٩٨٢

اساسيات البصريات - فرانسيز .أ. جينكيز . هارفي أ. هوايت . دار ماكروهل للنشر - نيويورك . ١٩٨١

المراجع الاجنبية

1- C. kittel , " Introduction to Solid State Physics " 5th edn, John Wiley & Sons Inc (1976).

2- M. A. Omar, Elementary Solid State Physics " 1st edn, Addison-Wesley Pub. Co. (1975).

3- H. M. Rosenberg. " The Solid State ". 2nd edn Clarendon Press Oxford, (1978).

4- L. Pincherle, " Electronic Energy Band in Solid " 1st edn Macdonald & Co. Ltd. (1971).

5- J. Crangle, " The magnetic Properties of Solid " 1st edn, Edward Arnold. (1977).

6- B. D. Cullit, " Elements of X - ray Diffraction " 3rd edn. Addison - Wesley Pub. Co. Inc.

7- J. S. Blackmore, " Solid State Physics " 2nd edn - W. B. Sounders Co. (1974).

8- A. H. Davis, " Solid : An Introduction " McGrow. Hill Co. LTD (1978).

9- D. A. Davies " Waves, Atoms and Solid " 1st edn Longman Group LTD, (1978).

10- I. H. Wilson " Engineering Solids " McGrow. Hill Co. LTD (1979).

11- R. A. Levy " Principle of Solid State Physics " 2nd edn. A cademic Press Inc. (1968).

12- N. W. A sheroft and N. D. Mermin " Solid State Physics ".

13- C. M. Hurds " The Hall - Effect in Metals and Alloys ". 1st edn Plenum Press. (1972).

14- C. M. Hurds " Electron in Metals " 1st edn. John Wiley & Sons. (1975).

15- S. M. Sze " Semiconductor devices Physics and Technology ". 1st edn. John Wiley & Sons (1985).

16- J. S. Dugdale " The Electrical Properties of Metals and Alloys ". 1st edn. Edward Arnold. (1977).

17- S. P. Seth and D. V. Gupta. " Acourse in Electrical engineering Materials" 2nd edn. Dhanpat Rai & Sons (1981).

18- A. Chelkowski " Dielectric Physics " Pwin - Polish Scientific Pub . (1980).

19- P. Wilkes " Solid State Theory in Metallurgy " Cambridge Univ. Press. (1973).

20- G. Fowles " Introduction Modern Optics " 2nd edn. Holt T. Rinehatl and Winston Inc. (1975).

21- R. A. Smith " Semiconductorc " Cambridge Univ. Press. (1968).

22- T. VanDuzer & C. W. Turner. " Principles of Superconductive Devices and Ciruit ". 1st edn Edward Arnold (1981).

المصطلحات العلمية الواردة في الكتاب

A

Amorphous	عشوائي (لابلوري)
Absolute – Temperature	درجة الصفر المطلق
Anomalous	شاذ
Attenuation	توهين
Angular	زاوي
Accoustic branch	الفرع السمعي
Anti – bonding	ضديد التأصر
Alloy	سبيكة

B

Band theory	نظرية الحزم
Brillouin – zones	مناطق بريلوين
Boundary conditions	الشروط الحدودية
Bond	اصرة
Bravais lattice	الشبيكة البرافيزية
Basis	الاساس

C

Crystallography	علم البلورات
Crystal lattice	الشبيكة البلورية
Conduction band	حزمة التوصيل
Current density	كثافة التيار
Crystal defect	عيوب البلورة
Cycltron frequency	التردد السايكلتروني (المداري)
Curie constant	ثابت كوري

Critical	حرج
Coherence	ألتصاق أو أتافق
Cut – off frequency	تردد القطع

D

Diamagnetic	الدايا مغناطيسية
Debye model	نموذج ديباي
Density of state	كثافة الحالة
Dielectric	مادة عازلة
Diffraction	الحيود
Dislocation	الانخلاع
Degenercy	تضاعف
Discrete	منفصل
Dispersion relation	علاقة التفريق
Drift vdocity	سرعة الانسياق

E

Electrical resistivity	المقاومة النوعية الكهربائية
Energy	طاقة
Energy – levels	مستويات الطاقة
Equilibrium	توازن (أتزان)
Etching	تقشيط

F

Fermi surface	سطح فيرمي
Forbidden	غير مسموح (ممنوع)
Function	دالة
Ferromagnetic	الفيرو مغناطيسية
Field emission	أنبعاث مجالي
Forward bias	انحياز امامي

G

Ground state	الحالة الدركية
Grains	حبيبات
Gas constant	ثابت الغاز
Group velocity	سرعة مجموعة الامواج

H

Hall effect	ظاهرة هول
Hole	فجوة
Hund's rule	قاعدة هوند
Hexagonal closed packet	سداسي متلاصق الرص

I

Impurities	شوائب
Internal field	المجال الداخلي
Inversion operation	عملية الانقلاب
Interplaner distance	المسافات البينية

J

Juncti on	ملتقى

K

Kondo effect	ظاهرة كوندو

L

Lattice constant	ثابت الشبيكة
Long – range order	ترتيب طويل المدى
Localized	موضعي (غير متمركز)

M

Miller Indices	معاملات ميلر
Magnetic domains	الحجيرات المغناطيسيه
Magnetic Flux	الفيض المغناطيسي
Mean free path	معدل المسار الحرّ

Mobility	تحركية
Macro scopic	التي ترى بالعين المجردة
Microwave	الموجات الدقيقة
Mode	نمط
Magnetiztion	تمغنط

N

Normal state	الحالة الاعتيادية
Normal processes	العمليات الاعتيادية
Non – Crystalline	غير بلوري
Nuclear Magnetic Resonance	رنين نووي مغناطيسي

O

Optical branch	الفرع البصري
Oscillator	متذبذب
Orbital	مدار

P

Paramagnetic	بارامغناطيسية
Primitive cell	الخلية البدائية
Point operation	العملية النقطية
Point defect	العيوب النقطية
Phonon	الفونون
Phase velocity	سرعة الطور
Phase factor	عامل الطور
Polycrystalline	متعدد البلورات
Period	دورة
Pair distribution function	دالة التوزيع الثنائي
Permea bility	نفاذية (انفاذية)
Pentration	اختراق
Pattern	هيكل – شكل
Persistance current	التيار الدائم
Permeability	السماحية

Q

quantized	مكمم
quantum number	عدد كمي

R

Residual	متبقي او متخلف
Resonance	رنين
Reciprocal lattice	شبيكة مقلوبة
Relaxation	استرخاء
Rotational operation	عملية الدوران
Response	استجابة

S

Short range order	ترتيب صغير المدى
Super conductivity	فرط الايصال
Spin	برم
Soft magent	مغناطيس مطاوع
Skin depth	عمق سطحي
Symmetry	تماثل . تناظر
Scattering	استطارة
Susceptibility	التأثرية
Size effect	التأثير الحجمي (التأثر الحجمي)

T

Thermal vibration	الاهتزاز الحراري
Thermalised	تهدأة
Translation operation	عملية الانتقال

U

Umklapp process	عملية امكلاب
Un – harmonic effect	تاثير لا توافقي
Unit cell	وحدة الخلية

V

Valence band	حزمة التكافؤ
Vander waals force	قوة فان ديرفالز
Virtual	افتراضي

W

Wave front	جبهة الموجة
Wave lenght	طول الموجة
Work fanction	دالة الشغل

Z

Zero – point energy	طاقة نقطة الصفر

رقم الايداع في المكتبة الوطنية ببغداد ٧٦ لسنة ١٩٨٨

مطابع مديرية دار الكتب للطباعة والنشر

جامعة الموصل


مديرية دار الكتب للطباعة والنشر
جامعة الموصل